



Dynamique de la cristallisation de la graine : expériences et modèles.

Renaud Deguen

► To cite this version:

Renaud Deguen. Dynamique de la cristallisation de la graine : expériences et modèles.. Géophysique [physics.geo-ph]. Université Joseph-Fourier - Grenoble I, 2009. Français. NNT : . tel-00414613v2

HAL Id: tel-00414613

<https://theses.hal.science/tel-00414613v2>

Submitted on 14 Oct 2009

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

OBSERVATOIRE DES SCIENCES DE L'UNIVERS DE GRENOBLE

LABORATOIRE DE GÉOPHYSIQUE INTERNE ET TECTONOPHYSIQUE

Thèse

présentée par

Renaud DEGUEN

pour obtenir le grade de

Docteur de l'Université Joseph Fourier de Grenoble

Spécialité : Géophysique

Dynamique de la cristallisation de la graine : expériences et modèles

Composition du jury :

Guillaume FIQUET	Université Pierre et Marie Curie (Paris)	Rapporteur
Yanick RICARD	Ecole Normale Supérieure de Lyon	Rapporteur
Michael I. BERGMAN	Bard College (Great Barrington)	Examineur
Annie SOURIAU	Université Paul Sabatier (Toulouse)	Examineur
Jean VIRIEUX	Université Joseph Fourier (Grenoble)	Examineur
Thierry ALBOUSSIERE	Université Joseph Fourier (Grenoble)	Directeur de thèse
Daniel BRITO	Université Joseph Fourier (Grenoble)	Co-Directeur de thèse

Abstract

Seismic observations of the Earth's inner core reveal unexpected structural complexity, its most striking property being its elastic anisotropy. The inner core has been slowly crystallizing from the liquid outer core, and its structure and dynamic may be in part related to the process of solidification. A stability analysis of the solidification front suggests that the inner core boundary is morphologically unstable, and that a dendritic layer should have developed. This dendritic layer may extend deep in depth, but thermosolutal convection associated with the solidification and compaction of the solid matrix are expected to efficiently expell the residual liquid. We present an experiment of solidification under a large gravity, which allows to increase the strength of the convective phenomenon associated with solidification. It is shown that the enhancement of solutal and thermal transport have important consequences on the structure of the dendritic layer, and increases significantly its solid fraction. A last part is devoted to the mechanisms from which the seismic anisotropy may originates. It is shown that the internal dynamic of the inner core depends critically on the thermal and solutal evolution of the outer core. If the inner core is relatively old, it is likely to be stably stratified, and vertical motions are inhibited. Heterogeneous growth of the inner core results in a shallow shear layer. If the inner core has grown rapidly, a thermally driven convective episode may have occurred in its early history.

Résumé

La graine terrestre telle que vue par la sismologie présente une structure étonnament complexe, à commencer par une anisotropie cylindrique de ces propriétés élastiques. La graine cristallise lentement à partir du noyau liquide, et il est possible que sa structure et sa dynamique soit liée à sa cristallisation. Une analyse de stabilité du front de solidification suggère que celui-ci est instable vis-à-vis d'une instabilité morphologique qui se manifeste par la formation d'une zone biphasique où des dendrites solides coexistent avec un liquide enrichi en soluté. Du point de vue thermodynamique, cette couche biphasique pourrait s'étendre jusqu'au centre de la graine, mais il est probable que la convection thermo-solutale associée et la compaction de la matrice solide y réduisent rapidement la fraction liquide. Une seconde partie présente un dispositif expérimental de cristallisation sous forte gravité, permettant d'intensifier les phénomènes de convection liés à la cristallisation. Il y est montré que la convection thermo-solutale rétroagit fortement sur la structure de la zone dendritique, et y augmente significativement la fraction solide. Une dernière partie porte sur les mécanismes susceptibles d'être à l'origine de l'anisotropie. L'importance de l'évolution thermochimique du noyau est mise en avant. Si la graine est relativement âgée, celle-ci est stratifiée de manière stable et les mouvements verticaux y sont interdits. La déformation induite par une croissance hétérogène est focalisée dans une couche cisailante à la surface de la graine. Si la croissance de la graine est rapide, elle a pu convecter au début de son histoire et être progressivement stabilisée par la stratification chimique.

Remerciements

Je tiens en premier lieu à remercier Thierry et Daniel pour m'avoir fait confiance pendant près de quatre ans, dès mon stage de M2R. J'ai beaucoup appris à leur contact, à la fois d'un point de vue scientifique et humain. Thierry et Daniel ont toujours su se montrer disponibles et prêts à discuter dans la bonne humeur, tout en me laissant une liberté appréciée. J'espère avoir encore l'occasion de profiter de leur sens physique et de leur grande culture scientifique dans les années à venir ! J'ai aussi beaucoup apprécié travailler avec Philippe qui a beaucoup apporté à cette thèse et m'a initié au monde de la modélisation numérique. Je tiens aussi à remercier tout particulièrement Patrick et Jean-Paul qui m'ont aidé et supporté au quotidien dans la conception et la mise au points des expériences et m'ont appris énormément.

Les remerciements des manuscrits de mes prédécesseurs sont unanimes : l'équipe géodynamo est une équipe formidable ! Un grand merci donc à Henri-Claude, Dominique, Franck, Elisabeth, Céline, Denys, Adeline, Thierry, Jean-Paul, Nathanael, Daniel, Patrick, Nadège, Philippe, Claire, Nicolas, Marine, Alex pour leur gentillesse, leur disponibilité, leur curiosité et pour les discussions à bâton rompu en réunion d'équipe ou autour d'un café ! Bonne installation à Claire, qui aurait pu tomber plus mal, et bon courage à Elisabeth et Céline pour la dernière ligne droite !

Je tiens aussi à remercier chaleureusement les membres de mon jury, Annie Souriau, Mike Bergman, Yanick Ricard, Guillaume Fiquet et Jean Virieux pour leur lecture attentive de mon manuscrit, ainsi que pour leurs conseils et les discussions pre- et post-soutenance.

Merci aux participants des réunions du groupe 'graine' SEDIT, qui ont été l'occasion d'échanges multidisciplinaires riches et motivants. Merci donc à Marie Calvet, Annie Souriau, Ludovic Margerin, Raphael Garcia, Marc Monnereau, Guillaume Fiquet, Yanick Ricard, Sébastien Chevrot. Merci à nos amis géochimistes pour le prêt de la centrifugeuse, et à Martine Lanson et Delphine Tisserand en particulier pour leur aide et leurs conseils. Un grand merci à mes acousticiens préférés, Philippe Roux et Pierre Gouedard, pour m'avoir initié aux méthodes acoustiques et donné de précieux coups de pouce. Merci à Dominique Gibert et Florence Nicollin pour m'avoir très gentiment fait profiter de leur expérience de concepteurs de capteurs piezos. Merci enfin à Thierry Duffar pour ses éclaircissements métallurgiques.

Merci à Alex et Manu, mes tuteurs de monitorat successifs, pour, entre autres, leurs conseils pédagogiques et leur confiance. Merci aussi à Eric Quirico, Anne Simienski,

Mai-linh Doan avec qui j'ai apprécié travailler et partager les enseignements.

Merci aussi à Gregory Fanjat, Assane Ndieguene, Jonathan Serafini, Charlotte Regnier, Mickaël Melzani et Mathilde Roberge, qui, le temps d'un stage, m'ont donné un précieux coup de main ! Bonne chance à vous pour la suite !

Merci enfin à tous les amis et collègues de bureau sans qui ces dernières années n'auraient pas été ce qu'elles ont été. Merci à Nicolas et Marielle pour les soirées gastronomico-musicales et les ballades en montagne, à Aloé, Anthony, Seb, Pierre et Fred pour les réunions musicales, à Elisabeth, Albanne, Laurent, Nadège, Sylvain, Florence, Fabien, Gregory, Céline, Paola. Merci enfin aux amis de toujours ou presque, Fabien et Caro, Loic et Angélique, Simon, Amandine et la petite Camille, Edouard et Aurélie, Malvina, Mathieu et Apolline.

Merci pour tout, Stéphanie.

Table des matières

1	Introduction géophysique	1
1.1	La graine sismologique	2
1.1.1	Structure radiale	2
1.1.2	Anisotropie sismique et structures tridimensionnelles	5
1.1.3	Rotation différentielle	10
1.2	Chimie et minéralogie du noyau	12
1.2.1	Composition chimique du noyau - la question des éléments légers	12
1.2.2	Éléments radioactifs	16
1.2.3	La courbe de fusion du fer	16
1.2.4	Minéralogie du fer sous haute pression	17
1.2.5	Propriétés élastiques	18
1.3	Dynamique de la graine	20
1.3.1	Origine de l'anisotropie ?	20
1.3.2	Écarts à la symétrie cylindrique	26
2	Régime de cristallisation de la graine	29
2.1	Introduction	29
2.2	Quelques notions fondamentales de solidification	31
2.2.1	Mélanges binaires - diagramme de phase	31
2.2.2	Condition de Stefan et conservation du soluté à l'interface	32
2.2.3	Équation de Clapeyron, effet de Gibbs-Thomson et pente du li- quidus	33
2.2.4	Transport de la chaleur et du soluté	36
2.3	Énergétique du noyau et cristallisation de la graine	36
2.3.1	Bilan énergétique du noyau	36
2.3.2	Conditions thermo-chimiques à proximité de l'ICB	39
2.4	Instabilité morphologique en présence d'un gradient de pression	42
2.4.1	Mécanisme de l'instabilité	42
2.4.2	Mise en équations	44
2.4.3	Adimensionnement	45
2.4.4	Instabilité linéaire	47
2.5	Résultats et discussion	50
2.6	Un modèle de formation d'une couche dense à la base du noyau ?	55
2.6.1	La cristallisation de la graine selon Gubbins <i>et al.</i> (2008)	56
2.6.2	Fusion locale et formation d'une couche dense riche en fer	56

3	Cristallisation sous un fort champ de gravité	61
3.1	Introduction	61
3.2	Convection dans une zone dendritique - Phénoménologie	62
3.3	Dispositif expérimental	67
3.4	Étude de la réponse acoustique d'une zone dendritique	70
3.5	Cristallisation d'une solution de NH_4Cl sous forte gravité	70
3.5.1	Résultats expérimentaux préliminaires	70
3.5.2	Interprétation	73
3.5.3	Modélisation	75
3.5.4	Résultats	80
4	Déformation de la graine et anisotropie	87
4.1	État thermique et chimique de la graine	87
4.1.1	Le géotherme - la graine peut-elle convecter ?	87
4.1.2	Stratification chimique	93
4.2	Croissance hétérogène et déformation	95
4.2.1	Avant-propos	95
4.2.2	Le modèle de Yoshida <i>et al.</i> (1996)	97
4.2.3	Prise en compte de la stratification	101
4.2.4	Résultats et discussion	104
4.3	Une étude comparative de différents mécanismes de déformation	111
5	Conclusions & perspectives	117
5.1	Régime de cristallisation de la graine	117
5.2	Déformation de la graine et origine de l'anisotropie	118
5.3	Perspectives planétologiques	120
	Bibliographie	121

ANNEXES

Article : On the presence and structure of a mush at the Earth's inner core boundary.	141
Article : Tectonic history of Earth's inner core preserved in seismic structure.	156
Article : Iron meteorites and the physics of core crystallization in small differentiated bodies	167

1 Introduction géophysique

L'histoire scientifique de la graine commence en 1936 avec la parution de l'article fondateur, sobrement intitulé P' , d'Inge Lehmann (1936). A cette époque la sismologie est en pleine expansion et les présomptions d'existence d'un noyau dense, riche en fer, au coeur de la planète (*e.g.* Wiechert, 1896) sont confirmées par les travaux d'Oldham, Gutenberg, Wiechert ou Jeffreys en particulier (voir Brush (1980) pour un excellent historique de la découverte du noyau). En une vingtaine d'années, à la suite des premiers arguments sismologiques apportés par Oldham (1906), l'idée d'un noyau liquide (Jeffreys, 1926) situé à environ 2900 km de profondeur (Gutenberg, 1913) s'affirme peu à peu.

Une conséquence majeure de la présence du noyau est l'existence d'une *zone d'ombre* des ondes P (Gutenberg, 1913) : en raison de la baisse brutale de la vitesse de propagation des ondes P entre le manteau et le noyau, les ondes P sont réfractées vers le bas lors de leur passage à travers la frontière noyau/manteau (CMB, pour *Core Mantle Boundary*) et aucune arrivée d'onde P n'est prédite pour des distances épacentrales comprises entre $\sim 110^\circ$ et 140° . Inge Lehman observe pourtant de manière systématique des arrivées d'ondes P dans une partie de la zone d'ombre. Elle attribue ces arrivées à la réflexion d'ondes P à une profondeur de l'ordre de 5000 km, une estimation raisonnable de la profondeur aujourd'hui acceptée de l'interface graine-noyau (5150 km selon PREM), et découvre ainsi l'existence de la graine.

Il a été suggéré très tôt que la graine pouvait être rigide, Francis Birch propose dès 1940 que la graine puisse être composée de fer cristallisé à partir du fer liquide qui constituerait le noyau externe, en conjecturant que la température de fusion augmente suffisamment rapidement avec la pression pour dépasser la température réelle au centre de la Terre (Birch, 1940). Cet argument, largement accepté aujourd'hui et supporté par de nombreux travaux expérimentaux et théoriques, a été repris par Jacobs (1953) qui suppose que la graine cristallise de manière continue en réponse au lent refroidissement du noyau (figure 1.1). Il a pourtant été difficile de prouver la rigidité de la graine et il faudra attendre les travaux de Dziewonski & Gilbert (1971), basés sur l'étude des modes propres, pour avoir confirmation du caractère solide de la graine. Ce n'est que très récemment que la propagation d'ondes de cisaillement (l'onde PKJKP) a été observé de manière convaincante (Deuss *et al.*, 2000; Cao *et al.*, 2005; Wookey & Helffrich, 2008).

Les trente dernières années ont vu la découverte de propriétés inattendues, à commencer par l'anisotropie élastique de la graine, et l'émergence de modèles étonnamment complexes de la structure de la graine. Les principales observations sismologiques de la graine seront présentées dans le § 1.1, et les différents arguments quant à la nature chimique et la minéralogie du noyau et de la graine dans le § 1.2. Les différents modèles dynamiques proposés pour expliquer les propriétés sismologiques seront discutés dans le § 1.3.

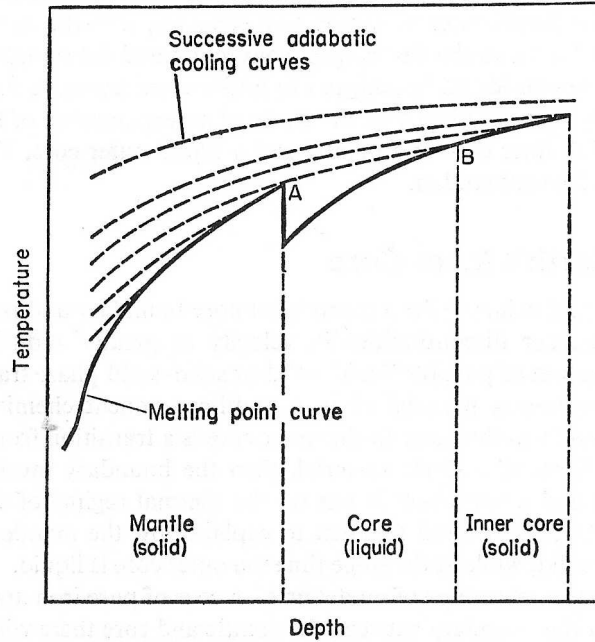


Figure 1.1 – Refroidissement du noyau et cristallisation de la graine, d’après Jacobs (1953). Le profil de température dans le noyau liquide est supposé adiabatique, et le profil de température de solidification est supposé plus raide que l’adiabat. Au cours du refroidissement du noyau, la température de solidification est d’abord atteinte au centre du noyau et la cristallisation de la graine débute donc au centre de la Terre. La limite graine noyau est ensuite donnée par l’intersection entre le profil de température de solidification et l’adiabat.

1.1 La graine sismologique

1.1.1 Structure radiale

La frontière qui sépare la graine du noyau externe, l’ICB (pour *Inner Core Boundary*) est une discontinuité de premier ordre, dont l’épaisseur est inférieure à 5 km (Cummins & Johnson, 1988). La densité dans le noyau à proximité de la graine est de l’ordre de $12\,000\text{ kg.m}^{-3}$. Le saut de densité au niveau de l’ICB $\Delta\rho_{\text{icb}}$ est un paramètre malheureusement mal contraint : des estimations basées sur l’étude des modes propres d’oscillation de la graine (PREM, par exemple) donnent des valeurs comprises entre 250 et 1000 kg.m^{-3} , alors que des méthodes utilisant les rapports d’amplitudes d’ondes réfléchies sur la surface de la graine (PKiKP) donnent des valeurs significativement plus élevées, de l’ordre de 600 à 1800 kg.m^{-3} . Les estimations les plus récentes semblent converger vers un saut de densité de 600 à 900 kg.m^{-3} (Cao & Romanowicz, 2004; Koper & Pyle, 2004), le modèle PREM indiquant un saut de densité de 600 kg.m^{-3} (Dziewonski & Anderson, 1981). Le saut de densité $\Delta\rho_{\text{icb}}$ est significativement plus grand que le changement de densité dû au seul changement de phase solide-liquide (de l’ordre de 200 kg.m^{-3}), ce qui suggère une différence de composition appréciable entre la graine et le noyau.

La vitesse des ondes P dans la graine est bien contrainte par l’inversion des temps de trajet des ondes de volume et des modes propres, la vitesse des ondes S, en l’absence

d’observations suffisamment nombreuses et robustes d’onde PKJKP, étant estimée à partir des modes propres. La vitesse des ondes S obtenue par ce biais est relativement faible, indiquant une faible rigidité. La valeur du coefficient de Poisson qui découle de v_P et v_S , $\nu = 0.44$, est ainsi anormalement grand pour un solide, et significativement plus grand que ce que prédisent les modèles minéralogiques du fer. Pour comparaison, ν est de l’ordre de 0.29 dans le manteau, et prend la valeur de 0.5 dans un liquide (rigidité nulle). Cette observation a été interprétée comme indiquant la présence de fusion partielle dans la graine (Doornbos, 1974). Ce n’est cependant pas la seule explication possible. Certains métaux ont des coefficients de Poisson de cet ordre ($\nu = 0.42$ pour l’or par exemple) et il n’est pas impossible que le fer solide ait cette propriété à haute pression (Falzone & Stacey, 1980).

L’atténuation dans la graine

L’étude de l’amplitude des ondes PKIKP montre une forte atténuation des ondes de volume dans la graine (ou de manière équivalente un faible facteur de qualité Q_α). La plupart des études s’accordent à dire que les 200 km supérieurs de la graine sont très atténuants, avec un facteur de qualité de l’ordre de 100 à 400 (*e.g.* Bhattacharyya *et al.*, 1993; Souriau & Roudil, 1995; Garcia, 2002; Li & Cormier, 2002). La partie centrale de la graine, pour des rayons inférieurs à 500 km semble en revanche être moins atténuante (Li & Cormier, 2002). En revanche, des valeurs beaucoup plus forte, $Q \sim 1500 - 4000$, sont estimées à partir de l’amortissement des modes propres (*e.g.* Masters & Gilbert, 1981). Le contraste entre l’atténuation des modes propres et des ondes de volume peut être expliqué de plusieurs manières.

Il est important de reconnaître que les facteurs de qualité estimés à partir des modes propres et des ondes de volume peuvent avoir une signification physique différente. L’atténuation des ondes P peut *a priori* avoir une contribution viscoélastique (atténuation ‘intrinsèque’ due à l’anélasticité, ou à la présence de fusion partielle (Doornbos, 1974)) ainsi qu’une contribution due au scattering des ondes de volume (*e.g.* Cormier & Li, 2002), le facteur de qualité mesuré des ondes P pouvant s’écrire comme $Q_\alpha^{-1} = Q_{ve}^{-1} + Q_{sc}^{-1}$, où Q_{ve} quantifie l’atténuation visco-élastique et Q_{sc} l’atténuation par scattering. Le facteur de qualité visco-élastique peut s’écrire en fonction des facteurs de qualité Q_μ et Q_κ qui quantifient l’atténuation liée respectivement au cisaillement et à la compressibilité,

$$Q_{ve}^{-1} = kQ_\mu^{-1} + (1 - k)Q_\kappa^{-1}, \quad (1.1)$$

où $k = \frac{4}{3}(v_S/v_P)^2$ (*e.g.* Cormier & Li, 2002; Souriau, 2007). L’amortissement des modes est principalement sensible à Q_μ , ceux-ci dissipant leur énergie essentiellement par cisaillement. Dans le manteau, Q_κ étant beaucoup plus grand que Q_μ , $Q_\alpha \propto Q_\mu$ et l’atténuation des ondes de volume est cohérente avec l’amortissement des modes propres. Une manière de réconcilier les résultats des ondes de volume avec ceux des modes propres est donc d’invoquer une faible valeur de Q_κ . Une seconde possibilité consiste à supposer une forte dépendance fréquentielle de Q_μ . Enfin, une troisième possibilité est de supposer qu’une part importante de l’atténuation des ondes de volume est liée au scattering dans la graine ou à l’ICB.

L’hypothèse d’une forte atténuation par scattering est supportée par la récente observation que la phase PKiKP est souvent (mais pas toujours) suivie d’une coda (Vidale

& Earle, 2000; Poupinet & Kennett, 2004; Peng *et al.*, 2008). La présence de cette coda indique la présence de structures de petite échelle (~ 1 km) dans la partie externe de la graine (Vidale & Earle, 2000) ou à l'ICB (Poupinet & Kennett, 2004), qui pourrait expliquer la forte atténuation des ondes de volume. En soi, la mise en évidence de ces hétérogénéités a été une surprise, la graine ayant été traditionnellement vue comme un milieu homogène. Calvet & Margerin (2008) modélisent la partie la plus superficielle de la graine par un agrégat de cristaux anisotropes (ou de domaines caractérisés par une même orientation) ayant une orientation aléatoire, et proposent que les codas observées résultent de la diffusion et de la diffraction de l'onde PKIKP dans ce milieu. Calvet & Margerin (2008) ont montré que la modélisation de la propagation des ondes P et S dans ce milieu pouvait apporter des contraintes fortes sur la minéralogie et les propriétés élastiques du fer dans la graine. Ils montrent en particulier que les vitesses efficaces des ondes P et S dans un milieu diffusant peuvent être très différentes de la moyenne de Voigt couramment utilisée pour estimer les vitesses sismiques dans un agrégat à partir des propriétés élastiques des cristaux. L'effet est particulièrement important pour la vitesse des ondes S et ce type d'approche pourrait réconcilier l'observation d'une vitesse lente dans la graine avec les modèles minéralogiques qui en général suggèrent une vitesse significativement plus grande.

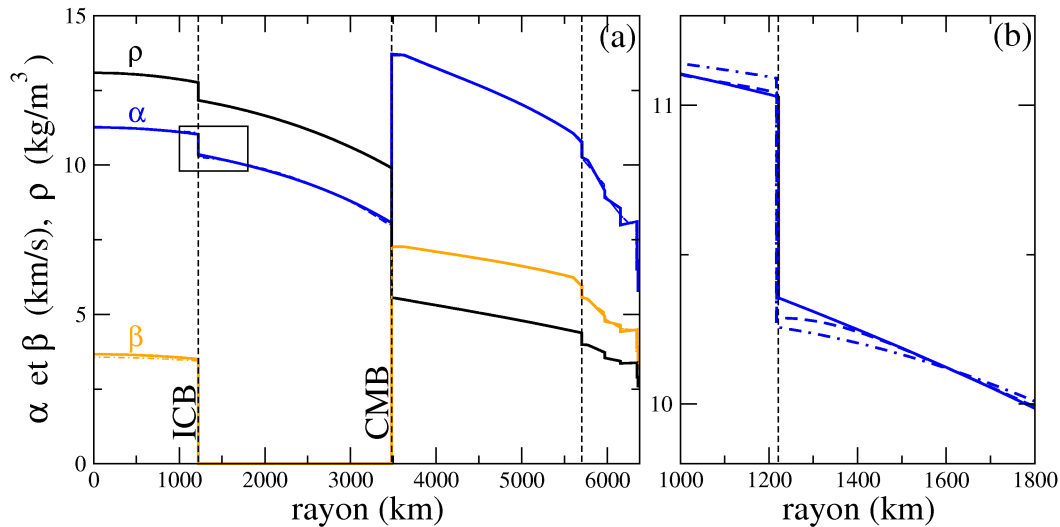


Figure 1.2 – (a) Vitesse des ondes P (α , bleu) et S (β , orange) d'après les modèles globaux PREM (—, Dziewonski & Anderson (1981)), iasp91 (-.-, Kennett & Engdahl (1991)) et ak135 (-.-, Kennett *et al.* (1995)); densité (ρ , noir) d'après PREM. (b) Profils de vitesse des ondes P au voisinage de l'ICB, selon PREM, iasp91 et ak135. Les modèles iasp91 et ak135 présentent tous deux un faible gradient de vitesse dans une couche de 300 à 400 km d'épaisseur à la base du noyau externe.

Une couche stable à la base du noyau ?

Dans le modèle PREM, les modèles de vitesse et de densité dans le noyau sont contraint *a priori* par l'hypothèse de stratification marginalement stable, correspondant à un profil de température adiabatique. Après inversion, le modèle final s'écarte peu de

cette contrainte, et le coefficient de Bullen, qui mesure l'écart à l'adiabaticité, est proche de 1 dans tout le noyau (ou de manière équivalente, la fréquence de Brunt-Väisälä est proche de 0). Les travaux de Souriau & Poupinet (1991) suggèrent pourtant l'existence d'une couche, épaisse d'environ 100 à 150 km, où le gradient de vitesse des ondes P est plus faible.¹ Cette caractéristique est présente dans les modèles sismologiques moyen plus récents, tels ak135 (Kennett *et al.*, 1995) (*c.f.* figure 1.2.b), et est supportée par plusieurs études ultérieures (Souriau & Roudil, 1995; Song & Helmberger, 1995b).

Cette observation est difficile à expliquer dans le cadre du modèle traditionnel de convection thermo-solutale dans le noyau (voir discussion chapitre 2 § 2.6), et, si elle est avérée, pourrait forcer la communauté géophysique à revoir sa vision de la convection dans le noyau. Si l'on suppose cette couche chimiquement homogène, le profil de vitesse implique, d'après la loi de Birch ($v_P \propto \rho$), que cette couche doit être sous-adiabatique et donc stratifiée stablement. Si au contraire on attribue cette couche à une stratification chimique, on est forcé de conclure que cette couche doit être appauvrie en éléments légers à sa base, car le coefficient de compressibilité est moins affecté que la densité par la composition (Gubbins *et al.*, 2008). Là encore, la stratification est stable. Bien qu'incompatible avec les modèles actuels de convection, cette conclusion reste toujours plus satisfaisante physiquement que la conclusion opposée : une couche instable de 100 km dans le noyau liquide a très peu de chance de perdurer et d'être observée par la sismologie. Il a aussi été proposé que cette couche pouvait être expliquée par la présence de cristaux en suspension, mais la fraction solide nécessaire pour expliquer les données est beaucoup trop grande pour être réaliste (Gubbins *et al.*, 2008). Gubbins *et al.* (2008) privilégient une origine chimique de cette couche, mais le mécanisme de sa mise en place est loin d'être clair (voir discussion chapitre 2, § 2.6).

1.1.2 Anisotropie sismique et structures tridimensionnelles

Poupinet *et al.* (1983) sont les premiers à observer une différence de temps de trajet, de l'ordre de 2 secondes, entre les ondes PKiKP se propageant dans la direction N-S et dans le plan équatorial. Poupinet *et al.* (1983) ne parlent pas encore d'anisotropie sismique et proposent d'expliquer cette observation par la présence d'hétérogénéités de vitesse dans la graine (une région anormalement rapide située au niveau des pôles, par exemple). Ils évoquent aussi la possibilité d'une excentricité de la graine comme origine de cette différence de trajet, mais on peut facilement se convaincre que la différence de temps de trajet ne peut pas s'expliquer de cette manière. La vitesse v_P^s des ondes P dans la graine étant plus grande que la vitesse v_P^ℓ dans le liquide, il faudrait que le rayon polaire R_p de la graine soit plus grand que le rayon équatorial R_e de la graine pour que le trajet N-S soit plus rapide. En supposant pour simplifier le saut de vitesse $\Delta v_P = v_P^s - v_P^\ell$ indépendant de la pression, la différence de rayon qui permettrait d'expliquer une différence de temps de trajet de l'ordre de 2 secondes serait de l'ordre

¹Cette couche est à ne pas confondre avec la couche F qui était présente à la base du noyau externe dans les premiers modèles sismologiques globaux. La présence de cette couche dans les modèles globaux était due à l'observation de précurseurs des ondes PKP interprétés comme étant dûs à la réflexion d'ondes P sur une discontinuité située environ 200 km au-dessus de l'ICB. Le développement de réseaux sismologiques denses, qui permettent de calculer l'angle d'incidence de chaque phase par des méthodes de formation de voies (beamforming), a permis de montrer que ces précurseurs résultaient en réalité de la diffraction de l'onde PKP dans la couche D" (Cleary, 1972; King *et al.*, 1974).

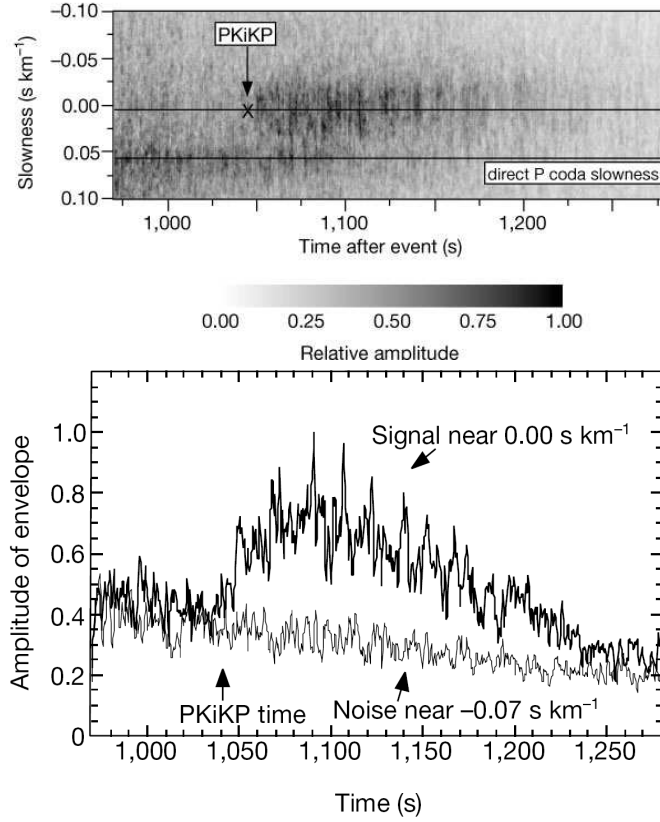


Figure 1.3 – PKiKP et sa coda, d’après Vidale & Earle (2000).

de

$$R_p - R_e \simeq \frac{v_P^s v_P^\ell}{\Delta v_p} \frac{\delta t}{2} \simeq 200 \text{ km.} \quad (1.2)$$

Une telle excentricité, en plus d’être difficile à maintenir dynamiquement, ne passerait pas inaperçue ! En analysant les temps d’arrivées d’ondes PKiKP, Souriau & Souriau (1989) montrent que la graine ne s’écarte pas de manière observable de sa figure d’équilibre, avec une ellipticité très proche de la valeur théorique de $1/411$ induite par la rotation.

Trois ans plus tard, Morelli *et al.* (1986) et Woodhouse *et al.* (1986) proposent conjointement que l’anomalie de temps de trajet notée par Poupinet *et al.* (1983) et le splitting anormal des modes propres sensibles au noyau peuvent être expliqué par une anisotropie sismique cylindrique de la graine. Comme Poupinet *et al.* (1983), Morelli *et al.* (1986) observent une différence de temps de propagation entre les trajets équatoriaux et les trajets polaires de 2 s, impliquant une anisotropie moyenne de l’ordre de 1 %, le temps nécessaire à la propagation d’une onde P à travers la graine étant de l’ordre de 200 s. En terme de dépendance radiale, Morelli *et al.* (1986) privilégient une anisotropie forte, de l’ordre de 3 %, à proximité de l’ICB, et diminuant en profondeur. Il a été observé (e.g. Masters & Gilbert, 1981) que plusieurs modes propres sensibles à la structure du noyau présentent un splitting anormal (*i.e.* non explicable par des effets d’ellipticité ou par la rotation de la Terre). Woodhouse *et al.* (1986) montrent que cette

observation peut être expliquée par une anisotropie de vitesse des ondes P dans la graine. Suivant la dépendance radiale supposée du taux d'anisotropie (uniforme ou diminuant avec la profondeur), Woodhouse *et al.* (1986) obtiennent une anisotropie moyenne de l'ordre de 4 % et 2 % respectivement, qui se traduiraient par une différence de temps de trajet entre rais polaires et équatoriaux de l'ordre de 8 s et 4 s respectivement, une anomalie significativement plus forte que celle observée par Poupinet *et al.* (1983) et Morelli *et al.* (1986).

L'hypothèse d'une graine anisotrope s'est ensuite peu à peu imposée comme l'explication la plus plausible des anomalies de temps de trajet des ondes de volume et du splitting anormal des modes propres, et l'on a ensuite cherché à caractériser en détail la géométrie de l'anisotropie. La tâche est ardue : la graine est une cible bien petite pour la sismologie et est soustraite au regard du sismologue par plus de 5000 km de roche et de fer en fusion. Les ondes de volume sont peu énergétiques, leur zone de Fresnel est large (diamètre de l'ordre de 200 à 500 km pour des ondes de volume de période de 1 à 5 s (Calvet *et al.*, 2006)), les trajets polaires sont rares, et l'analyse et l'interprétation des temps de trajet est rendue difficile par la présence d'hétérogénéités dans la couche D'' et dans la croûte. Peu de modes propres² sont sensibles à la structure du noyau et de la graine et leur sensibilité est toujours nulle au centre de la Terre et donc faible dans une grande partie de la graine. Ces modes sont aussi sensibles au manteau, avec souvent plus de 50 % de leur énergie dans le manteau, ce qui implique que l'effet des hétérogénéités et de l'anisotropie dans le manteau, en plus de ceux de la force de Coriolis et de l'ellipticité, doivent être corrigés au préalable.

Alors que les travaux pionniers (Poupinet *et al.*, 1983; Morelli *et al.*, 1986) ont considéré directement les temps de trajet des ondes PKP_{df}, les travaux ultérieurs sur les ondes de volume ont plus souvent étudiés les différences de temps de trajet entre PKP_{df} et une phase traversant le noyau liquide, PKP_{bc}, ou PKP_{ab} prise comme référence, ceci dans le but de s'affranchir des erreurs de localisation de la source et, dans la mesure du possible, de diminuer la sensibilité des mesures aux hétérogénéités dans la croûte et la couche D'' (*cf.* figure 1.4 pour une définition et une description des phases des ondes P dans le noyau et la graine). La traversée de la couche D'' reste néanmoins un problème majeur pour la sismologie du noyau, et l'hypothèse d'une origine dans la couche D'' de la dépendance directionnelle du temps de trajet des ondes traversant la graine a même été avancée (Bréger *et al.*, 2000a,b; Romanowicz & Bréger, 2000). Des arguments forts en faveur d'une origine dans la graine proviennent de l'analyse des temps différentiels PKP_{df}-PKP_{bc}. Shearer *et al.* (1988) ne trouvent pas d'anomalies significatives de temps de trajet pour la phase PKP_{bc}, contrairement à la phase PKP_{df}, ce qui suggère que l'anomalie provient bien de la graine. Song & Helmberger (1993) observent que les anomalies des temps différentiels PKP_{df}-PKP_{bc} sont corrélés avec les anomalies des temps de trajet des PKP_{df}, mais pas avec les PKP_{bc}, ce qui là encore favorise une origine dans la graine de ces anomalies.

Il est difficile de distinguer entre anisotropie et hétérogénéités de vitesse par l'étude des modes propres (Song, 1997), mais l'étude des ondes de volume favorise l'anisotropie. Les anomalies de temps de trajet semblent dépendre plus fortement de la direction du rai que de la localisation géographique de la région éclairée (Creager, 1992), et le niveau d'hétérogénéités dans la graine semble de toute façon être trop faible, < 0.3 %, pour

²De plus, seuls les modes propres sphéroïdaux sont utilisables - les modes toroïdaux pourraient exister dans la graine, mais ne sont pas observables en surface à cause du noyau liquide.

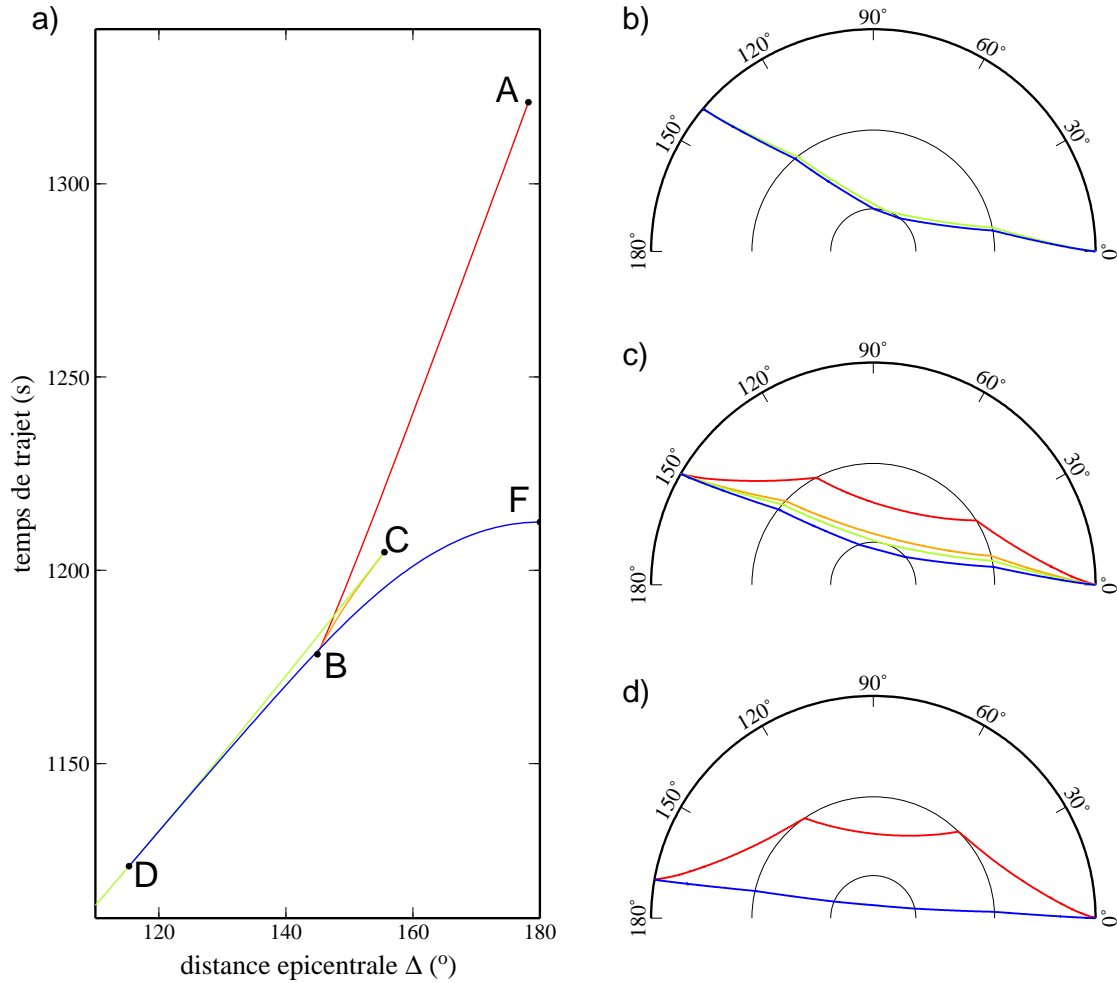


Figure 1.4 – Principales phases sismiques dans le noyau et la graine. a) hodo-chrones des phases PKP (PKP_{ab} et PKP_{bc}), PKiKP (PKP_{cd}) et PKIKP (PKP_{df}) montrant la triplication de la phase PKP. Sont représentées dans les sous-figures a, b et c les phases présentes à des distances épicentrales de 140°, 150° et 170° respectivement ; rouge : PKP_{ab}, orange : PKP_{bc}, vert : PKP_{cd}, bleu : PKP_{df}. Aux distances épicentrales inférieures à ~ 115°, correspondant au point D, seule la phase PKiKP existe, mais est difficilement observable car peu énergétique. (Le calcul des hodo-chrones et des rais ont été effectués grâce au logiciel TauP, disponible à l'adresse <http://www.seis.sc.edu/taup/index.html>.)

expliquer les anomalies observées (Garcia & Souriau, 2000).

Le désaccord apparent sur le taux d'anisotropie entre les premiers résultats des ondes de volume (Poupinet *et al.*, 1983; Morelli *et al.*, 1986) et des modes propres (Woodhouse *et al.*, 1986) a été résolu dans les années 90, en grande partie en raison de l'anisotropie plus grande qui émerge des travaux plus récents, de l'ordre de 3 % (Creager, 1992; Song & Helmberger, 1993), compatible avec les résultats des modes propres. Tromp (1993) montre qu'une anisotropie cylindrique de la graine explique le splitting de tous les modes propres identifiés comme anormaux et obtient un modèle d'anisotropie en très bon accord avec les résultats des ondes de volume (Creager, 1992; Song & Helmberger, 1993; Shearer, 1994; Su & Dziewonski, 1995; Garcia & Souriau, 2000).

Si la présence d'une anisotropie moyenne de l'ordre de 3 % dans la graine semble généralement acceptée, la structure fine (variations radiales et écarts à la symétrie cylindrique) de l'anisotropie reste débattue. Des modèles assez contradictoires ont été publiés.

La partie la plus superficielle de la graine semble isotrope ou faiblement anisotrope ($< 1\%$), sur une épaisseur de l'ordre de 150 km (Song & Helmberger, 1995a; McSweeney *et al.*, 1997; Garcia & Souriau, 2000; Garcia, 2002). Plus étonnant, le taux d'anisotropie semble être plus faible dans l'hémisphère est (40° E à 180° W) que dans l'hémisphère ouest (Tanaka & Hamaguchi, 1997; Creager, 1999; Niu & Wen, 2001). Il semblerait que la manière la plus plausible d'expliquer cette observation soit d'invoquer une variation hémisphérique de l'épaisseur de la couche isotrope. Garcia & Souriau (2000) estiment l'épaisseur de cette couche à ~ 100 km dans l'hémisphère ouest et ~ 400 km dans l'hémisphère est, et trouvent que les données sont bien expliquées si le taux d'anisotropie à des profondeurs plus importantes est constant de l'ordre de 3 % (*c.f.* figure 1.5).

Ishii & Dziewoński (2002) ont proposé l'existence d'une sous-graine, de rayon ~ 300 km, ayant des propriétés élastiques qui diffèrent de celles des couches plus externes. Ishii & Dziewoński (2002) proposent que cette sous-graine présente un minimum de vitesse de propagation des ondes P à un angle de 45° de l'axe de rotation; à partir des mêmes données, ils privilégieront plus tard une augmentation du taux d'anisotropie dans la sous-graine (Ishii & Dziewoński, 2003). Beghein & Trampert (2003), à partir de l'analyse du splitting anormal de modes propres, construisent un modèle présentant de fortes variations radiales d'anisotropie et suggérant un changement du signe de l'anisotropie à un rayon de l'ordre de 400 km et un minimum de vitesse de propagation dans la direction N-S. Sun & Song (2008a,b) ont construit par inversion du temps de trajet d'ondes PKIKP un modèle tridimensionnel de la texture de la graine qui favorise l'existence d'une sous-graine de rayon ~ 600 km, présentant une vitesse de propagation minimale à 45° de l'axe de rotation, et maximale le long de l'axe de rotation et dans le plan équatorial. Il semble cependant que les données actuelles ne permettent pas de trancher entre les différents modèles. Calvet *et al.* (2006) ont montré en inversant des données de résidus d'ondes PKIKP que des modèles de graine caractérisés par la présence d'une sous-graine de rayon 450-550 km expliquent aussi bien les données si l'axe N-S est lent ou rapide. Le problème semble être une fois encore le nombre trop restreint de données ayant des trajets polaires. Le problème est mal contraint et les résultats de l'inversion dépendent beaucoup de l'*a priori*.

Caractériser la nature des transitions (discontinues ou progressives) entre les différentes sous-couches de la graine pourrait apporter des contraintes fortes sur leur nature et leur origine (orientation progressive des cristaux de fer, changement de phase, ...?). Song & Xu (2002) affirment observer une triplication des ondes PKIKP qu'il interprètent comme

étant due à une discontinuité entre la couche isotrope et la graine plus profonde, dont ils estiment l'anisotropie à $\sim 8\%$ juste en-dessous de la zone de transition. Ouzounis & Creager (2001) privilégient une transition progressive. Leyton *et al.* (2005) et Cormier & Stroujkova (2005) n'observent pas de signe tangible de discontinuité dans la graine et privilégient donc eux aussi une transition progressive entre les différentes couches.

En analysant conjointement l'amplitude et les résidus d'ondes PKP_{df} et PKP_{cd} , Souriau & Romanowicz (1996, 1997) ont mis en évidence une anisotropie d'atténuation corrélée avec l'anisotropie de vitesse. Les trajets polaires sont atténués de manière plus importante que les trajets équatoriaux. Cette observation est importante, et peut apporter des contraintes supplémentaires sur le mécanisme d'atténuation (anélasticité ou scattering) et la dynamique de la graine.

Très récemment, Wookey & Helffrich (2008) ont rapporté l'observation d'une onde dont le temps d'arrivée correspond au temps de propagation théorique de la phase PKJKP selon ak135, et est interprétée comme telle. Wookey & Helffrich (2008) observent aussi l'arrivée d'une onde ~ 7 s après la PKJKP, qu'ils attribuent à l'onde S lente issue du splitting des ondes S par l'anisotropie élastique de la graine. La différence de temps de trajet entre les deux PKJKP requiert une anisotropie moyenne de l'ordre de 1% . Cette observation peut potentiellement apporter des contraintes fortes sur le mécanisme de formation de l'anisotropie.

1.1.3 Rotation différentielle

Gubbins a montré dès 1981 que la graine pouvait être entraînée en rotation différentielle par rapport au manteau par un couple électromagnétique issu de l'interaction entre champ poloidal et toroïdal. Les calculs numériques de Glatzmaier & Roberts (1995, 1996) sont venu appuyer de manière significative la proposition de Gubbins (1981), en prédisant une super-rotation de la graine de l'ordre de $2^\circ/\text{an}$. Ce taux de rotation est considérable, et induirait une rotation de la graine de plusieurs dizaines de degrés en 20 ou 30 ans. Au début des années 80, la caractérisation sismologique de la graine est encore balbutiante et l'observation d'une éventuelle rotation différentielle de la graine semble hors de portée. Lorsque les résultats de Glatzmaier & Roberts (1995, 1996) sont publiés, en revanche, les sismologues disposent d'un outil permettant en théorie de mesurer une rotation différentielle : l'anisotropie sismique de la graine et ses écarts à la symétrie cylindrique.

Quelques mois plus tard, Song & Richards (1996) et Su *et al.* (1996) détectent une évolution du temps de propagation le long du trajet Îles Sandwich-Alaska de l'ordre de 0.3 s en trente ans, qui semble indiquer une super-rotation de l'ordre de $1^\circ/\text{an}$ (Song & Richards, 1996) à $3^\circ/\text{an}$ (Su *et al.*, 1996). L'évolution du temps de trajet est attribué au changement de la direction apparente de l'anisotropie le long d'un trajet qui résulterait de la rotation de la graine si l'axe de symétrie de l'anisotropie était penché par rapport à l'axe de rotation. L'inclinaison de l'axe de symétrie de l'anisotropie n'est pas une observation très robuste cependant ; Souriau *et al.* (1997) montrent ainsi qu'une inclinaison apparente peut résulter d'une couverture sismologique incomplète.

Depuis, le problème de la rotation différentielle a été l'objet de nombreux travaux (voir Souriau (2007) pour une review). Des méthodes plus fiables ont été développées (utilisation de doublets (Poupinet *et al.*, 2000; Zhang *et al.*, 2005), de la coda des ondes

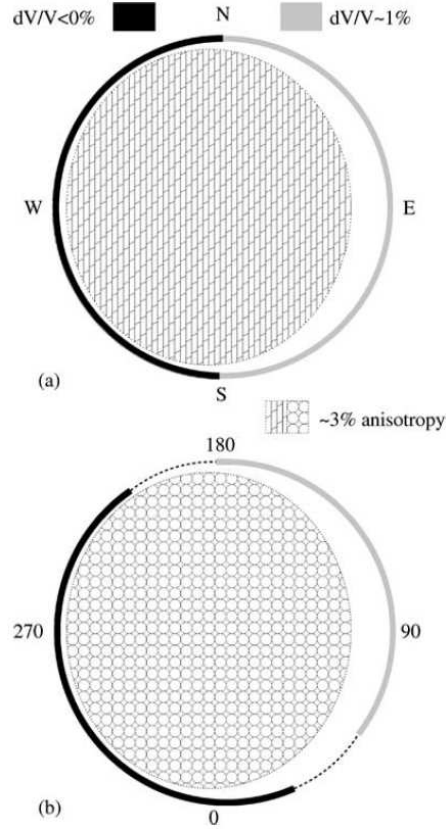


Figure 1.5 – La structure interne de la graine selon Garcia (2002). Le centre de la graine à une anisotropie constante, de l'ordre de 3 %, et est entouré par une couche isotrope ou faiblement anisotrope, d'épaisseur ~ 100 km dans l'hémisphère ouest et ~ 400 km dans l'hémisphère est.

PKiKP (Vidale *et al.*, 2000)). La plupart des études les plus récentes convergent vers un faible taux de rotation, de l'ordre de $0-0.3^\circ/\text{an}$, à la limite des capacités de détection des méthodes actuelles (Souriau, 2007).

Du point de vue dynamique, le couple électromagnétique susceptible d'entraîner la graine en rotation (Aurnou *et al.*, 1996, 1998) est contrebalancé par le couple induit par le couplage gravitationnel entre la graine et le manteau. Celui-ci est dû à la présence d'hétérogénéités de densité dans le manteau qui déforment les surfaces équipotentielles dans le noyau. A l'équilibre thermodynamique, la surface de la graine doit correspondre à une surface équipression et donc équipotentielle. Les hétérogénéités dans le manteau induisent donc une topographie à l'ICB qui couple la graine au manteau. Une faible rotation de la surface de la graine par rapport au manteau entraîne un couple de rappel gravitationnel du même ordre que le couple électromagnétique pour une rotation de l'ordre de 0.5° seulement (Buffett, 1997). Par conséquent, la graine ne peut être en rotation différentielle que si elle se déforme de manière à garder sa surface confondue avec une surface équipotentielle. Le taux de rotation différentielle de la graine est alors limité par le temps de relaxation visqueuse de la graine, $\tau \sim \eta/(\Delta\rho g r_{\text{ic}})$, où η est la viscosité dynamique, $\Delta\rho$ le saut de densité à l'ICB, g l'accélération de la pesanteur et r_{ic} le rayon de la graine (Buffett, 1997). L'observation de la rotation différentielle de

la graine apporte alors une contrainte forte sur la viscosité de la graine : une rotation différentielle de l'ordre de $1^\circ/\text{an}$ requiert une viscosité inférieure à 10^{16} Pa.s (Buffett, 1997), et une viscosité dix fois plus grande si le taux de rotation est de l'ordre de $0.1^\circ/\text{an}$.

Très récemment, Wen (2006) et Cao *et al.* (2007), puis Song & Dai (2008) ont observé une variation locale de topographie de l'ICB, de l'ordre de 500 m (Cao *et al.*, 2007) à 2 km (Wen, 2006), en l'espace d'une dizaine d'années. Cette observation étonnante peut être attribuée soit à une rotation de la topographie de la graine, sans déformation (quid alors du couplage gravitationnel avec le manteau?), ou à une croissance localisée et anormalement rapide de la graine (le taux de cristallisation expliquant une variation locale du rayon de l'ordre de 500 m en 20 ans est cinq ordres de grandeur supérieur au taux de cristallisation moyen de la graine). Il est à noter que pour conserver une topographie significative de longueur d'onde $\lambda \sim 10$ km comme proposé par Cao *et al.* (2007), pendant une durée τ d'une dizaine d'année, la viscosité doit être supérieure à $\eta > \Delta\rho_{\text{icb}}g\lambda\tau \sim 10^{16}$ Pa.s. Cela semble plausible au regard des estimations de la viscosité de la graine (entre 10^{11} Pa.s et 10^{21} Pa.s suivant les auteurs...). Au vu de l'incertitude sur η , l'observation d'une telle topographie, si elle s'avère robuste, pourrait apporter des contraintes fortes sur la rhéologie de la graine.

1.2 Chimie et minéralogie du noyau

1.2.1 Composition chimique du noyau - la question des éléments légers

Il a été admis assez tôt que le noyau et la graine sont composés principalement de fer. Les premières spéculations basées sur le moment d'inertie de la Terre et sur l'observation de météorites différenciées riches en fer, et de leurs alter ego silicatées, ont été confirmées par les travaux pionniers de Birch (1952, 1964) en particulier, qui, en comparant la densité du noyau estimée par la sismologie aux résultats des premières expériences hautes pression, a montré que le noyau devait être composé majoritairement de fer. La densité du noyau est cependant environ 10 % plus faible que celle du fer pur et le noyau doit donc comporter, outre un peu de nickel probablement, une quantité assez importante d'éléments plus légers (Birch, 1952, 1964). De plus, la différence de densité entre le liquide et le solide est trop importante pour être expliquée par le seul effet du changement de phase : outre la présence d'éléments légers dans le noyau, ces observations montrent que la concentration en éléments légers est différente dans la graine et dans le noyau liquide. La graine contiendrait une quantité plus petite, mais non négligeable, d'éléments légers (Jephcoat & Olson, 1987; Stixrude *et al.*, 1997; Fiquet *et al.*, 2001), à hauteur de 2 à 5 %. Le fait que la graine soit plus pauvre en éléments légers que le noyau liquide est un point fondamental pour la géodynamique du noyau : une partie au moins de ces éléments doit fractionner lors de la cristallisation de la graine et être incorporée préférentiellement dans le noyau liquide. Ce rejet préférentiel associé à la cristallisation de la graine fournit une part importante du flux de flottabilité responsable de la convection du noyau et de la génération du champ magnétique terrestre.

Si la présence majoritaire de fer dans le noyau est unanimement acceptée, la nature des éléments légers et leurs abondances restent très débattue. Connaître la nature et l'abondance des éléments légers présents dans le noyau est important pour au moins deux autres raisons : (i) la présence de ces éléments abaisse probablement le point de fusion du fer - la connaissance de leur abondance et de leurs diagrammes de phases est donc nécessaire à l'estimation de la température à l'ICB et dans le noyau ; (ii) nous

verrons (chap 2) que les détails du diagramme de phase de l'alliage Fe-Ni-Éléments légers, notamment la pente du liquidus et le coefficient de partage des éléments légers, déterminent en partie le régime de cristallisation de la graine.

Des contraintes supplémentaires sur la composition du noyau sont apportées par les modèles géochimiques de composition de la Terre, dont les grandes lignes peuvent être comprises à l'aide de la figure 1.6, issue de Wood *et al.* (2006). Dans cette figure, sont tracées les abondances de divers éléments dans la *Terre silicatée* (*i.e.* manteau + croûte), normalisées par rapport aux abondances chondritiques (ici, de type CI, considérées comme étant les plus primitives) de ces éléments, en fonction d'une mesure de la volatilité de chaque élément. L'hypothèse fondamentale des modèles géochimiques consiste à supposer que les planètes telluriques ont un matériel génétique commun, que l'on peut retrouver aujourd'hui encore dans les météorites non différenciées : l'abondance relative en éléments réfractaires (*i.e.* non volatils) sur Terre est chondritique.³ Le fait que cette hypothèse soit très bien vérifiée par les éléments réfractaires lithophiles (figure 1.6) est un argument fort en sa faveur. Dans ce cadre de pensée, l'appauvrissement de la Terre silicatée en éléments sidérophiles vis-à-vis des chondrites (figure 1.6) est interprété comme étant due à l'incorporation préférentielle de ces éléments dans le noyau. La composition du noyau en éléments réfractaires peut alors être estimée simplement en soustrayant la composition de la Terre silicatée à la composition de la Terre globale. Cette approche suggère que le noyau serait composé pour 85 % en masse de fer, ~ 5 % de nickel, de moins de 1 % de chrome et de moins de 0.2 % de cobalt. Reste environ 10 % pour les éléments légers... L'excellent accord avec les prédictions du couple minéralogie/sismologie est très encourageante, mais déterminer quels éléments composent les 10 % restants est autrement plus difficile.

Les éléments candidats doivent répondre à trois critères : (i) être légers, pour expliquer la densité du noyau, (ii) être abondants et (iii) être sidérophiles. En tenant compte du fait que le comportement sidérophile de la plupart des éléments candidats peut dépendre fortement des conditions T, P et redox, les meilleurs candidats sont H, O, C, S, P et Si (McDonough, 2003; Wood *et al.*, 2006). Ces éléments sont tous au moins modérément volatils, et leur appauvrissement observé sur la figure 1.6 est donc dû *a priori* à une combinaison entre perte par le système Terre et incorporation dans le noyau. Toute la difficulté est d'estimer les contributions relatives de ces deux effets.

L'approche la plus raisonnable est de comparer l'abondance de ces éléments dans la Terre silicatée à des éléments lithophiles de volatilité comparable, dont l'appauvrissement ne peut être dû qu'à leur volatilité. Ainsi le soufre est très appauvri en comparaison avec d'autres éléments de volatilité similaire comme le zinc (figure 1.6) et est donc probablement présent dans le noyau. En corrigeant de l'effet de la volatilité, on estime qu'environ 2 % en poids pourrait être présent dans le noyau (Allègre *et al.*, 1995; Dreibus & Palme, 1996; McDonough, 2003). Une approche similaire suggère que l'abondance de

³En pratique, le terme "chondritique" a une signification assez large... la composition chimique des différentes classes de chondrites montre une dispersion importante. Dans la figure 1.6 la composition de référence est celle des chondrites carbonées de type CI (Wood *et al.*, 2006), qui sont les chondrites les plus primitives et les plus riches en éléments volatils. C'est un choix couramment fait, mais qui reste débattu (McDonough, 2003). Qui plus est, la Terre a probablement été formée à partir de matériel d'origine variée (condensés à des distances du Soleil variées (Bottke *et al.*, 2006; Stevenson, 2008)), et le choix forcément un peu arbitraire d'une classe de chondrite comme référence est peu satisfaisant lorsqu'on cherche une description fine de la chimie d'une planète. Il est possible de s'affranchir de ce choix en estimant la composition de la Terre globale en tirant partie de tendances observées dans la composition des chondrites et dans les roches mantelliques (e.g. Allègre *et al.*, 1995; Palme & O'Neill, 2003).

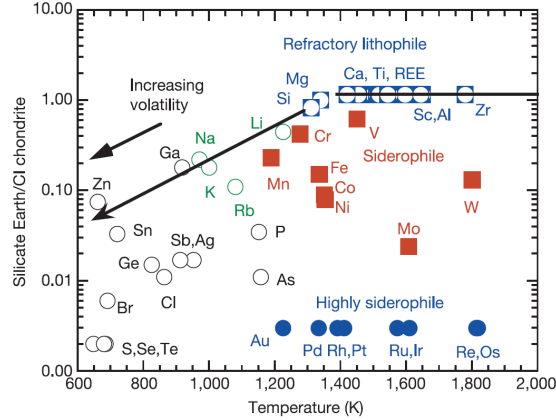


Figure 1.6 – Abondances relatives en éléments dans la Terre silicatée, pas rapport à la composition des chondrites de type CI, en fonction de la température de condensation (définie comme étant la température à laquelle 50% de l'élément considéré aurait condensé à partir d'un gaz de composition solaire à une pression de 10^{-4} bar). □ Éléments réfractaires lithophiles ; ■ Éléments sidérophiles ; ● Éléments hautement sidérophiles ; ○ Éléments volatils. D'après Wood *et al.* (2006).

P, H, et C est probablement inférieure à 0.2 %. Par élimination, les quelques % restant doivent probablement être attribués à la présence de O et/ou Si. Le comportement de ces deux éléments est très controversé et la communauté est encore loin d'un consensus à ce sujet.

Du point de vue des processus mis en jeu, la composition du noyau a été en grande partie fixée lors de la différenciation manteau-noyau (ou plus probablement lors *des* événements de différenciation (Stevenson, 2008)). Elle est en partie héritée de la composition des noyaux des embryons planétaires, mais doit probablement beaucoup aux transferts chimiques entre silicates et métal au cours de la différenciation. L'importance de ces transferts dépend évidemment du temps typique de différenciation et de la structure et taille caractéristique du mélange fer-silicates (diapirs de fer, émulsion ?), et a pu évoluer au cours de l'accrétion de la Terre et varier suivant la taille de l'impacteur, la fraction de manteau fondu, etc... (voir Rubie *et al.* (2007) pour une review). La solubilité des éléments légers candidats dépendant des conditions de pression, de température, et des conditions d'oxydoréduction (Rubie *et al.*, 2004; Wood *et al.*, 2006), la composition de la phase métallique incorporée au noyau est fonction des conditions thermophysiques du dernier point où le métal a été en équilibre chimique avec les silicates. Le fait même que le fractionnement des éléments observés dans la figure 1.6 n'est pas compatible avec les données expérimentales de coefficients de partage métal/silicates à pression et température ambiantes montre que le rééquilibrage chimique a soit été incomplet, soit eu lieu dans des conditions de haute pression, haute température (Wood *et al.*, 2006).⁴ La solubilité de O et Si à basses pressions et températures est faible mais peut changer de manière significative avec les conditions thermophysiques. La solubilité de Si augmente

⁴Les pressions et températures importantes où ce rééquilibrage a pu avoir lieu peut permettre l'incorporation dans le noyau d'éléments tels l'oxygène ou le silicium qui ne sont pas observés dans les météorites ferreuses, pour la plupart issues de planétésimaux de rayons probablement inférieurs à une centaine de kilomètres (Haack *et al.*, 1990).

à la fois avec la température et la pression (Gessmann *et al.*, 2001; Wade & Wood, 2005), ce qui en fait donc un bon candidat pour expliquer le déficit de densité du noyau. Le cas de O est plus controversé. Les études expérimentales s'accordent pour dire que sa solubilité augmente avec la température, mais l'effet de la pression est loin d'être clair, certaines études indiquant une augmentation de la solubilité avec la pression (Ohtani *et al.*, 1984), d'autres suggérant un comportement opposé (O'Neill *et al.*, 1998; Rubie *et al.*, 2004).

Enfin, il est possible que des transferts chimiques aient eut lieu au cours de l'histoire de la Terre entre le manteau et le noyau au niveau de la CMB (e.g. Brandon *et al.*, 1998; Buffett *et al.*, 2000; Brandon & Walker, 2005) et des expériences sous haute pression montrent qu'il est possible d'incorporer de l'oxygène et du silicium par réaction entre fer et perovskite (Knittle & Jeanloz, 1991). Le taux de transfert est sans doute assez faible si le manteau est solide à la CMB, limité par le taux de remplacement de matériel mantellique, mais a pu être important si, comme le proposent Labrosse *et al.* (2007), un océan magmatique basal a subsisté pendant une grande partie de l'histoire de la Terre.

De manière complémentaire à la géochimie, des contraintes sont apportées par une combinaison judicieuse de minéralogie et de sismologie. Une contrainte supplémentaire sur la composition du noyau est donnée par le saut de densité à l'ICB. Si l'on soustrait à $\Delta\rho_{\text{icb}}$ le changement de densité associé au seul changement d'état, de l'ordre de 200 kg.m^{-3} , il reste une différence de densité de l'ordre de 400 kg.m^{-3} qui est attribuée à la différence de composition entre la graine et le noyau liquide. Le fractionnement des éléments légers doit vérifier cette contrainte. Alfè *et al.* (2000, 2002a,b) ont estimé par des calculs *ab initio* les coefficients de partage de S, Si et O. Ces travaux suggèrent que S et Si partitionnent peu lors de la cristallisation, leurs coefficients de partage étant de l'ordre de 0.8, et conduisent à la conclusion inattendue que les abondances de S et Si doivent être sensiblement égales dans la graine et le noyau liquide. L'oxygène en revanche partitionnerait fortement ($k_{\text{O}} \sim 0.02$). Dans ce modèle, l'essentiel de la différence de densité entre graine et noyau liquide doit être expliqué par le fractionnement de l'oxygène qui doit donc être présent de manière importante dans le noyau. En combinant les contraintes données par les coefficients de partages et le déficit en densité du noyau et de la graine, Alfè *et al.* (2000, 2002a,b) estiment que 8.5 % (en mole) de Si et/ou de S sont présents dans la graine et 10 % de Si/S et 8 % d'O dans le noyau. Les coefficients de partage de Si et S étant similaires, cette approche ne permet pas de trancher entre S et Si. Alfè *et al.* (2000, 2002a,b) utilisent la valeur du saut de densité à l'ICB donné par PREM, qui est relativement faible comparé à d'autres valeurs publiées. Un saut de densité plus important suggérerait une concentration en éléments légers plus importante.

L'approche adoptée par Badro *et al.* (2007) consiste à chercher des compositions chimiques qui expliquent à la fois la densité et la vitesse des ondes P des modèles sismologiques. Badro *et al.* (2007) montrent expérimentalement que les composés FeS, FeS₂, FeSi et FeO obéissent chacun à une loi de Birch, qu'ils extrapolent vers les conditions de la graine et comparent avec le modèle PREM dans la graine. Les contraintes apportées par ce type d'approche sont fortes (mais à tempérer en raison de l'hypothèse de solution solide idéale effectuée) et suggèrent que l'abondance de S est probablement inférieure à 1 wt. % dans la graine. La présence de Si ou d'O peut en revanche être en accord avec à la fois la densité et la vitesse des ondes P dans la graine. En combinant ces résultats avec les estimations du fractionnement de Si, S et O par Alfè *et al.* (2000, 2002a,b), Badro *et al.* (2007) construisent un modèle chimique dans lequel la graine contient $\sim 2.3 \text{ wt. \%}$ de Si et des traces d'O, alors que le noyau liquide est composé à hauteur de 2.8 wt. %

% de Si et 5.3 wt. % d'O. Ce modèle est compatible avec les contraintes géochimiques.

1.2.2 Éléments radioactifs

La présence d'éléments radioactifs a été suggérée assez tôt comme une possible source d'énergie pour la dynamo (e.g. Verhoogen, 1980), et a à nouveau été l'objet d'une attention particulière dans les études les plus récentes sur l'énergétique du noyau (Labrosse, 2003; Nimmo *et al.*, 2004). Le candidat le plus souvent retenu est le potassium, dont l'isotope radioactif est ^{40}K , proposé initialement en raison de son appauvrissement, en comparaison avec du matériel chondritique, dans le manteau. L'hypothèse de la présence de potassium dans le noyau a longtemps été rejetée par la communauté géochimique. Le potassium est un élément volatil, non sidérophile (en tout cas à des pressions modérées), et son appauvrissement relatif aux chondrites peut très bien être expliqué par sa volatilité. Il est clair d'après la figure 1.6 que la présence de potassium dans le noyau n'est pas requise par la géochimie, l'abondance de K n'étant pas anormale comparée à celle d'autres éléments ayant une volatilité comparable. Pourtant, de récentes expériences hautes pression ont montré qu'à haute température et en présence de S dans la phase métallique le potassium pouvait être incorporé dans le noyau jusqu'à des concentrations, de l'ordre de 100 à 200 ppm (Gessmann & Wood, 2002; Murthy *et al.*, 2003; Lee & Jeanloz, 2003), suffisantes pour être significative du point de vue du bilan énergétique du noyau. Dans l'état actuel des connaissances la présence de potassium dans le noyau est possible, mais n'est requise ni par la géochimie, ni par la minéralogie. Les premières expériences similaires sur le comportement de l'uranium (Wheeler *et al.*, 2006) ne sont pas encore concluantes.

1.2.3 La courbe de fusion du fer

Malgré les efforts considérables d'un grand nombre d'équipes, le profil de température dans le noyau reste très mal contraint. Le noyau liquide est généralement supposé être bien mélangé et l'entropie peut y être considérée comme uniforme. Dans ces conditions, le gradient thermique moyen est adiabatique. Pour connaître le géotherme dans le noyau, il suffit donc de connaître la température en un point, et d'en déduire le profil de température en utilisant l'hypothèse du gradient adiabatique.

La courbe de fusion (ou plutôt de cristallisation) de l'alliage composant le noyau est une information de premier ordre puisqu'elle permet de contraindre directement la température à l'ICB, supposée être égale à la température de cristallisation, et par extension le géotherme dans le noyau. Le fer étant le constituant principal du noyau, l'effort de recherche de la communauté s'est naturellement portée en premier lieu sur les propriétés du fer pur.

Les conditions de pression dans le noyau sont aux limites des capacités actuelles d'expérimentation, et les expériences (en cellules à enclumes de diamant, ou d'ondes de choc) permettent maintenant d'atteindre les pressions du noyau et approchent celles de la graine. La caractérisation *in situ* a fait énormément de progrès, grâce en particulier au perfectionnement des méthodes de diffraction X. En parallèle les simulations numériques, notamment *ab initio*, ont énormément progressé et tiré parti de moyens numériques toujours plus puissants pour estimer la courbe de fusion du fer. Pourtant, la détermination de la courbe de fusion reste un défi pour la communauté. La figure 1.7 illustre la dispersion des courbes de fusion obtenues par différents groupes,

expérimentalement ou théoriquement. Extrapolées à 330 GPa, la pression de l'ICB, les estimations de la température de fusion varient entre environ 5000 K (Boehler (1993) ; cellule à enclumes de diamant) et près de 8000 K (Williams *et al.* (1987) ; ondes de choc). Les résultats les plus récents semblent cependant converger autour de la courbe de fusion *ab initio* du fer ϵ d'Alfè *et al.* (2004), raffinée par plusieurs études successives (Alfè *et al.*, 1999, 2002c, 2004), qui indique une température de 6250 ± 300 K à l'ICB. Cette courbe de fusion est en excellent accord avec les résultats d'expériences d'ondes de choc de Brown & McQueen (1986) et Nguyen & Holmes (2004) (*cf* figure 1.7), les calculs théoriques de Poirier & Shankland (1993) et les simulations de Belonoshko *et al.* (2000) après correction d'une approximation (Alfè *et al.*, 2004), et est en accord raisonnable avec les résultats d'expériences en cellules à enclumes de diamant de Williams *et al.* (1987), Shen *et al.* (1998) et Ma *et al.* (2004). En revanche, il reste un désaccord significatif avec les expériences d'ondes de choc de Yoo *et al.* (1993) dont les points de fusion sont environ 600 K au dessus de la courbe d'Alfè *et al.* (2004), ainsi qu'avec la courbe de fusion 'basse', environ 1000 K en dessous de celle d'Alfè *et al.* (2004), suggérée par les expériences en cellules à enclumes de diamant de Boehler (1993) et les calculs de Laio *et al.* (2000). De nouvelles études expérimentales semblent nécessaires pour clore le débat.

La présence, en plus du fer, d'une quantité non négligeable d'éléments légers incompatibles doit nécessairement abaisser le point de fusion de l'alliage. Compte tenu des incertitudes sur la température de fusion du fer pur, et des limites actuelles de l'expérimentation, on est encore loin de disposer des diagrammes de phases des différents mélanges pouvant représenter le liquide du noyau. Il est possible d'estimer l'effet de la présence de soluté sur le point de fusion en supposant que le mélange fer-éléments légers peut être considéré comme parfait (*cf.* chap. 2, § 2.2.3, et voir aussi Alfè *et al.* (2000, 2002a,b)). Cette approche suggère un abaissement du point de fusion de l'ordre de ~ 700 K.

1.2.4 Minéralogie du fer sous haute pression

Le diagramme de phase du fer est bien connu à pressions modérées : la forme cristalline stable du fer est cubique centrée (bcc, fer α) à pression et température ambiantes, devient cubique face centrée (fcc, fer γ) puis à nouveau bcc (fer δ) à plus haute température et hexagonale compacte (hcp, fer ϵ) à plus haute pression. Il y a un bon accord qualitatif sur la forme du diagramme et les différentes phases présentes en dessous de 100 GPa, mais l'accord entre les différentes études n'est quantitatif qu'à des pressions relativement basses - des différences de l'ordre de 500 K entre différentes études existent déjà à des pressions de l'ordre de 50 GPa. Toutes les études à hautes pressions et basses températures, aussi bien expérimentales que théoriques, s'accordent à dire qu'il n'y a pas de nouveau changement de phase et que la phase stable reste ϵ jusqu'aux pressions de la graine. A hautes températures et hautes pressions, le diagramme de phase est en revanche beaucoup plus controversé. En particulier, il pourrait exister une nouvelle phase haute pression/haute température qui serait alors la phase stable dans la graine (Brown & McQueen, 1986; Boehler, 1993; Saxena *et al.*, 1993). La nature et l'existence de cette phase restent débattue. Saxena *et al.* (1993) et Andrault *et al.* (1997) observent une transition de la phase ϵ vers une nouvelle phase qu'ils interprètent respectivement comme une phase 'double hcp' et une phase orthorhombique. Shen *et al.* (1998), Nguyen & Holmes (2004) et Ma *et al.* (2004) quant à eux n'observent pas de transition vers une

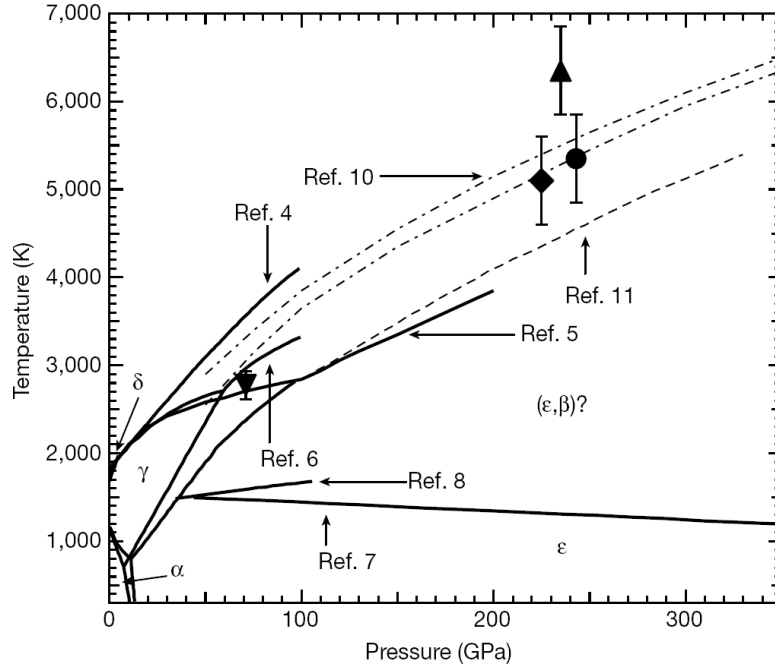


Figure 1.7 – Une compilation par Nguyen & Holmes (2004) de divers résultats expérimentaux et théoriques sur le diagramme de phase du fer. 4 : Williams *et al.* (1987); 5 : Boehler (1993); 6 : Shen *et al.* (1998); 7 : Saxena & Dubrovinsky (2000); 8 : Andrault *et al.* (2000); 10 : Alfè *et al.* (2002c); 11 : Laio *et al.* (2000).

nouvelle phase et interprètent l’observation d’une transition par certains groupes comme étant due à la présence d’impureté ou à un état hors équilibre.

En l’absence de consensus sur l’existence d’une nouvelle phase HT/HP, la phase ϵ reste privilégiée par la communauté pour le fer *pur* aux conditions de la graine. En revanche, un certain nombre de groupes se sont récemment focalisés sur l’effet d’impureté sur la stabilité des différentes phases candidates et leurs études semblent indiquer que la présence d’éléments légers (Lin *et al.*, 2002; Vočadlo *et al.*, 2003; Côté *et al.*, 2008) et de nickel (Dubrovinsky *et al.*, 2007) à des abondances plausibles pourraient stabiliser la phase bcc vis à vis de la phase hcp. Il est concevable que les deux phases coexistent aux conditions de la graine.

1.2.5 Propriétés élastiques

S’il est clair que la phase *hcp* est significativement anisotrope, l’amplitude de l’anisotropie et la dépendance directionnelle de la vitesse des ondes P restent très débattues. Les résultats expérimentaux sont difficiles à réconcilier avec les résultats numériques, qui sont eux même très disparates (*cf* figure 1.8). À température ambiante et à des pressions jusqu’à 211 GPa (Mao *et al.*, 1998), les études expérimentales sous enclumes à cellules de diamant semblent indiquer une dépendance en ‘cloche’ de la vitesse des ondes P en fonction de la direction de propagation, avec un maximum autour de 45°, et des vitesses comparables suivant les axes *c* et *a* (Mao *et al.*, 1998; Antonangeli *et al.*, 2004; Merkel *et al.*, 2005). Les calculs à 0 K de Söderlind *et al.* (1996) suggèrent un comportement similaire, avec un maximum de vitesse à 45° de l’axe *c*, alors que les calculs de Stixrude

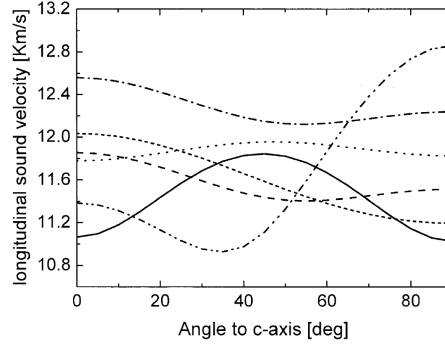


Figure 1.8 – Variations de la vitesse des ondes P dans un monocristal de fer *hcp* en fonction de la direction. Compilation par Antonangeli *et al.* (2004) ; — expériences à 211 GPa et température ambiante par Mao *et al.* (1998) ; calculs à 0 K par Cohen *et al.* (1997) (---), Söderlind *et al.* (1996) (···) et Stixrude & Cohen (1995) (— — —) ; calculs à 210 GPa et 300 K par Laio *et al.* (2000) (---) ; calculs à 6000 K et à une densité de 13000 kg.m^{-3} par Steinle-Neumann *et al.* (2001) (-·-·-).

& Cohen (1995), à 0 K, et ceux de Laio *et al.* (2000) à 300 K et 210 GPa semblent indiquer un axe *c* rapide et un axe *a* lent. L'effet de la température a été prise en compte par Steinle-Neumann *et al.* (2001) qui observent une inversion de l'anisotropie à haute température et prédisent un axe *c* lent et une vitesse maximale dans le plan basal aux pressions et températures de la graine. Leur traitement des effets de la température a cependant été mis en cause par Gannarelli *et al.* (2003, 2005) et leurs résultats sont souvent considérés avec circonspection. Pourtant, les paramètres élastiques calculés récemment par Vočadlo (2007) aux conditions P/T de la graine impliquent aussi un axe *c* lent.

Expérimentalement, l'une des difficultés provient du fait que la phase *hcp* n'est stable qu'à hautes pressions et que la transition *bcc* → *hcp* rend impossible l'obtention de monocristaux de fer *hcp*. L'assemblage polycristallin obtenu est texturé car les contraintes induites dans les cellules à enclumes de diamant ne sont pas isotropes, et l'effet de cette texture est difficile à prendre en compte (Merkel *et al.*, 2005; Antonangeli *et al.*, 2006). Les travaux d'Antonangeli *et al.* (2006) suggèrent que la forme en cloche observée dans les expériences utilisant la diffraction X angulaire (RXRD) pourrait être un artefact due à la texturation de l'assemblage polycristallin, qui est mal prise en compte par les modèles utilisés pour l'analyse des données de diffraction. Antonangeli *et al.* (2006) privilégient une forme sigmoïdale, avec l'axe *c* rapide et le plan basal lent, qui est la forme d'anisotropie la plus commune pour les métaux *hcp*, et qui est compatible avec les résultats des calculs de Stixrude & Cohen (1995) et Laio *et al.* (2000).

Stixrude & Cohen (1995) calculent une anisotropie assez faible, de l'ordre de 3 %, qui les a conduit à émettre l'hypothèse d'une graine monocristalline (ou un degré d'alignement presque parfait) pour expliquer l'anisotropie observée. Mais mis à part Stixrude & Cohen (1995), la plupart des études indiquent une anisotropie forte du fer ϵ qui suggère au contraire un alignement imparfait de l'agrégat.

Le fer *bcc* est lui aussi très anisotrope, avec, semble-t-il une propagation rapide selon la direction $\langle 111 \rangle$, et lente dans la direction $\langle 001 \rangle$ (Belonoshko *et al.*, 2008).

1.3 Dynamique de la graine

1.3.1 Origine de l'anisotropie ?

L'anisotropie sismique a le plus souvent été interprétée comme étant due l'orientation préférentielle de cristaux de fer présentant une anisotropie élastique. Une théorie alternative suppose la présence d'inclusions liquide ellipsoïdales orientées préférentiellement suivant l'axe N-S (Singh *et al.*, 2000).

Si l'on accepte que l'anisotropie de la graine est probablement due à l'orientation préférentielle de cristaux anisotropes, comprendre l'anisotropie sismique de la graine requiert la compréhension de processus à plusieurs échelles : (i) l'échelle du grain - quelle est la phase stable, et quelles sont ses propriétés élastiques ? (ii) l'échelle de l'agrégat - par quel mécanisme se développe un alignement préférentiel des cristaux ? Quelles sont les propriétés élastiques efficaces de l'agrégat ? (iii) l'échelle de la graine - comment expliquer la mise en place d'une texture cylindrique de grande échelle ?

(i) La question de la minéralogie et des propriétés élastiques du fer a été discutée dans les paragraphes 1.2.4 et 1.2.5. La phase stable du fer dans la graine est toujours sujette à débat ; le fer ϵ , qui a longtemps fait figure de candidat favori, n'est plus le seul en lice. La stabilisation de la phase *bcc* par la présence d'impureté en fait un bon candidat, et il est possible que la phase *bcc* domine dans la graine, ou coexiste avec le fer ϵ . Les propriétés élastiques du fer ϵ restent mal connues, avec deux principaux modèles radicalement opposés, l'un exhibant un axe *c* rapide et un axe *a* lent (Stixrude & Cohen, 1995; Laio *et al.*, 2000; Antonangeli *et al.*, 2006), l'autre un axe *c* lent et un axe *a* rapide (Steinle-Neumann *et al.*, 2001; Vočadlo, 2007).

(ii) Les mécanismes de texturation peuvent être de trois types :

- *texturation de cristallisation*, acquise lors de la solidification à l'ICB (Karato, 1993; Bergman, 1997; Bergman *et al.*, 2003; Brito *et al.*, 2002). Un certain degré d'alignement induit lors de la cristallisation est très probablement présent et cette texture initiale peut influencer, suivant le type de rhéologie, d'éventuels écoulements dans la graine.
- *texturation induite par une déformation* (Jeanloz & Wenk, 1988; Wenk *et al.*, 1988; Karato, 1999; Wenk *et al.*, 2000b; Buffett & Wenk, 2001). Ce mécanisme nécessite un écoulement à grande échelle dans la graine et une rhéologie capable d'induire un alignement préférentiel de l'agrégat cristallin. La question de la rhéologie est essentielle : un mécanisme de fluage par diffusion de défauts cristallins (*e.g.* Nabarro-Herring) ne produit aucune texture, et a même tendance à détruire une éventuelle texture préexistante. Un mécanisme de fluage par propagation de dislocation (power-law creep (Yoshida *et al.*, 1996) ou Harper-Dorn (Van Orman, 2004)) peut en revanche induire une orientation préférentielle de l'agrégat cristallin. La prédominance d'un mécanisme dépend en particulier de la taille des grains et des contraintes induites par l'écoulement (*c.f.* discussion chap 4 § 4.2.4), et il est bon de garder en mémoire que la rhéologie et la viscosité efficace peuvent dépendre de l'écoulement considéré. En général, un fluage par dislocation en loi de puissance nécessite des contraintes assez forte et/ou une taille de grains importante alors qu'un fluage par diffusion est favorisé lorsque les contraintes sont faibles et les grains petits. Van Orman (2004) a cependant proposé qu'une rhéologie de type Harper-Dorn (un autre mécanisme de fluage par dislocation, newtonien) serait le mécanisme prépondérant pour la gamme de contraintes attendues et pour une taille de grains supérieure à 30 μm . La viscosité prédite par Van Orman (2004) pour ce mécanisme

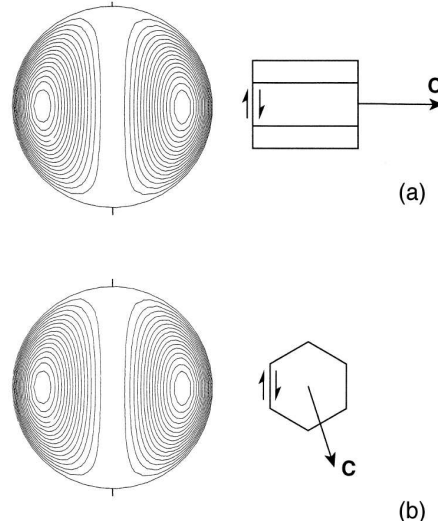


Figure 1.9 – Orientation préférentielle des cristaux de fer *hcp* suivant le système de glissement dominant, illustré par Poirier & Price (1999) dans le cas d’une cellule de convection de bas degré. L’orientation préférentielle est donnée pour la région en surface sous l’équateur pour laquelle le cisaillement est le plus important. **(a)** Si le système de glissement dominant est basal, l’axe *c* est orienté préférentiellement perpendiculairement aux lignes de courant. **(b)** Si le système de glissement dominant est prismatique le plan basal est orienté préférentiellement perpendiculairement à l’écoulement, et l’axe *c* s’oriente dans ce cas de figure dans la direction azimutale. Selon Poirier & Price (1999), aucun de ces deux cas de figure n’est compatible avec les observations sismologiques dans le cas d’un mode de convection tel que proposé par Jeanloz & Wenk (1988).

est très faible, $\sim 10^{11}$ Pa.s, ce qui rendrait le développement d’une texture relativement aisé.

Une autre question de première importance concerne la manière dont s’orientent les cristaux dans l’écoulement. Autrement dit, quel est le rapport géométrique entre le champ de déformation et la direction des axes cristallins ? C’est un point indispensable pour lier un processus de déformation global à l’anisotropie sismique qui en résulterait, et peut permettre de discriminer entre plusieurs modèles. Pour un fluage par dislocation, le développement d’une texture est contrôlé par ce qu’on appelle les *systèmes de glissement* du cristal, c’est à dire les plans cristallins selon lesquels le glissement est le plus facile. Il s’agit souvent des plans cristallins les plus denses (Vočadlo, 2007). Dans le cas du fer ϵ , le système de glissement le plus important semble être le plan basal (Poirier & Price, 1999; Wenk *et al.*, 2000b), l’axe *c* ayant alors tendance à s’orienter perpendiculairement à l’écoulement (figure 1.9; Poirier & Price (1999); Wenk *et al.* (2000b); Buffett & Wenk (2001)). Le cas du fer *bcc* n’a pas été étudié à ma connaissance. D’après Vočadlo (2007), de par la symétrie du fer *bcc*, de nombreux plans cristallins pourraient participer activement à la déformation, et cette variété de plans de glissement possibles rendrait difficile le développement d’une orientation préférentielle.

- *recristallisation sous contrainte* : dans un champ de contrainte anisotrope, la croissance par migration de joints de grains des cristaux orientés favorablement par rapport au champ de contrainte (de manière à minimiser l’énergie élastique) est favorisée par rapport aux autres grains, qui tendent à disparaître. Ce type de mécanisme a été proposé

par Yoshida *et al.* (1996) et Stevenson (1996). Yoshida *et al.* (1996) notent cependant que la mise en place d'une texture par ce mécanisme est un processus très lent pour la gamme de contraintes déviatoriques attendues dans la graine.

(iii) Le troisième point est sans doute encore plus controversé que les deux premiers. Une petite dizaine de mécanismes ont été proposés à ce jour, dans à peine plus d'articles, publiés pour la plupart dans des revues prestigieuses.

Par analogie avec l'anisotropie sismique du manteau supérieur, Jeanloz & Wenk (1988) et Wenk *et al.* (1988) attribuent l'anisotropie à une texture induite par la convection thermique de la graine, une théorie reprise plus tard par Weber & Machetel (1992) et Wenk *et al.* (2000a). Pour que la graine convecte, le géotherme doit y être super-adiabatique, et il n'est pas évident que cette condition soit vérifiée. Dans leur calcul, Jeanloz & Wenk (1988) n'ont pas tenu compte de l'importance de la compressibilité et ont calculé un nombre de Rayleigh pour la graine à partir d'une estimation du profil de température dans la graine, et non à partir de l'écart au gradient adiabatique. Leur nombre de Rayleigh, bien que très grand, correspond en réalité à un profil de température sous-adiabatique, et donc stable. Il est très souvent accepté que la diffusion de la chaleur dans la graine est suffisamment efficace pour y rendre le géotherme sous-adiabatique (*e.g.* Stacey, 1995; Yukutake, 1998) et rendre la graine stable vis-à-vis de la convection thermique. Nous le verrons au chapitre 4, cet argument n'est pas aussi fort que l'on a bien voulu le dire. Les modèles les plus récents d'évolution thermique du noyau indiquent la possibilité d'une graine significativement plus jeune que ce qui était accepté lorsque les calculs de Stacey (1995) et Yukutake (1998) ont été effectués, et l'incertitude forte sur la valeur de la conductivité thermique du fer dans la graine ne permet pas d'écarter la possibilité d'une graine marginalement instable. Si la convection thermique semble pouvoir induire des taux de déformation suffisants pour induire une anisotropie si le nombre de Rayleigh est supercritique (Wenk *et al.*, 1988, 2000a), un second problème de cette théorie est qu'elle n'explique pas l'orientation de l'anisotropie vis à vis de l'axe N-S.

Le fait que l'axe de l'anisotropie de la graine coïncide avec l'axe de rotation de la Terre - et avec l'axe du dipôle géomagnétique - est une observation de premier ordre; la plupart des théories proposées pour expliquer l'anisotropie sont guidées par l'idée qu'il ne s'agit pas d'une coïncidence. La rotation de la Terre ou le champ magnétique ont sans doute un rôle à jouer dans cette histoire, soit de manière directe, soit éventuellement via des couplages entre la graine et le noyau.

Yoshida *et al.* (1996) et Bergman (1997) ont proposé deux mécanismes pour lesquels l'anisotropie de la graine résulte indirectement de mouvements de convection anisotropes dans le noyau liquide. Ces modèles se basent sur l'idée que la convection dans le noyau s'organise, au moins aux grandes échelles, en colonnes géostrophiques bidimensionnelles (*colonnes de Taylor*) sous l'influence de la force de Coriolis (Busse, 1970; Cardin & Olson, 1994). Dans ce type de convection, le transfert de chaleur et d'éléments légers est privilégié dans les directions parallèles au plan équatorial et limité dans la direction de l'axe de rotation. La structure de la convection et son caractère bidimensionnel dépendent du forçage convectif, mais il semblerait que les conditions du noyau favorisent effectivement ce régime (King *et al.*, 2009).

Yoshida *et al.* (1996) proposent que ce flux de chaleur anisotrope induit un taux de

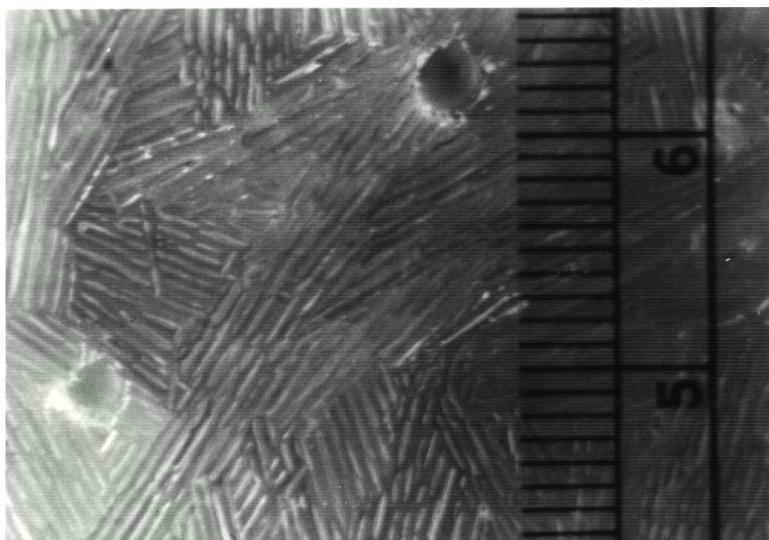


Figure 1.10 – Zone dendritique cristallisée à partir d’une solution d’eau salée, d’après Worster (1997). La photo est prise perpendiculairement au front de solidification. La zone de mush est composée de plaquettes de glace verticales ; la glace a une structure *hcp*, et le plan de chaque plaquette coïncide avec le plan basal des cristaux de glace, l’axe *c* étant dirigé perpendiculairement aux plaquettes.

cristallisation de la graine plus important au niveau de la ceinture équatoriale qu’au niveau des pôles, un phénomène plus tard observé expérimentalement dans des expériences de cristallisation d’eau salée en rotation (Bergman *et al.* (2005) ; figure 1.11.b) et suggéré par des calculs numériques (e.g. Glatzmaier & Roberts, 1998; Aubert *et al.*, 2008). En raison du saut de densité à l’ICB, la topographie résultant d’une croissance différentielle de la graine induit des contraintes non-hydrostatiques en volume qui nourrissent un écoulement solide de l’équateur vers les pôles (figure 1.11.a). Cette réponse isostatique de la graine est très similaire sur le principe au phénomène de rebond post-glaciaire observé dans le manteau. En régime quasi-stationnaire, l’intégralité de la croissance anisotrope de la graine est accommodée par cet écoulement et il ne subsiste qu’une très faible ellipticité résiduelle dont l’amplitude dépend de la viscosité et du taux de croissance différentielle de la graine. Les taux de déformation induits par cet écoulement ne sont pas suffisants pour induire une texture par déformation plastique ; Yoshida *et al.* (1996) proposent en revanche que le champ de contrainte induit par l’ellipticité résiduelle peut permettre le développement d’une texture par recristallisation sous contrainte. Le temps caractéristique d’alignement est cependant au moins de l’ordre de grandeur de l’âge de la Terre, et ce mécanisme pourrait être trop lent pour induire une texture conséquente à l’échelle de l’âge de la graine (Yoshida *et al.*, 1996).

Bergman (1997) quant à lui se base sur des expériences de solidification dendritique d’alliages métalliques qui montrent que les dendrites s’alignent préférentiellement dans la direction du flux de chaleur. La direction des dendrites reflétant un axe cristallin bien défini, ce mécanisme induit une texture, dite *texture de solidification*, qui est dictée par la direction du flux de chaleur (Bergman, 1997; Bergman *et al.*, 2000). Bergman (1997) propose que le caractère bidimensionnel de la convection induit une orientation préférentielle cylindrique des cristaux de fer à l’ICB, qui resterait gelée en volume à me-

sure que la graine grandit (figure 1.11.c). Il est connu que les matériaux *hcp* cristallisent sous forme de plaquettes parallèles au plan basal qui s'orientent parallèlement au flux de chaleur (*c.f.* figure 1.10; Wettlaufer *et al.* (1997); Worster (1997); Bergman *et al.* (2003)). L'axe *c* étant perpendiculaire à ces plaques, une texture cylindrique alignerait préférentiellement les axes *c* parallèlement à l'axe de rotation, ce qui pourrait ainsi expliquer l'anisotropie sismique. De plus l'élongation des cristaux de fer pourrait aussi expliquer l'anisotropie d'atténuation si celle-ci est dominée par une atténuation de scattering. Ce mécanisme est en revanche difficile à quantifier. Il est en particulier difficile d'estimer à quel point la direction du flux de chaleur s'écarte de la direction radiale. Dans leurs expériences de cristallisation d'une 'graine' à partir d'eau salée dans un hémisphère en rotation rapide, Bergman *et al.* (2005) observent une croissance différentielle corrélée avec l'anisotropie de flux de chaleur, comme prédit par Yoshida *et al.* (1996), mais n'observent pas d'orientation cylindrique des cristaux de glaces, leur croissance étant essentiellement radiale (*c.f.* figure 1.11.b; Bergman *et al.* (2005)). Brito *et al.* (2002) ont conduit des expériences de cristallisation de gallium qui montrent l'importance de l'orientation initiale des germes de cristallisation sur la texture finale - l'orientation des grains nouvellement cristallisé est fortement influencée par une texture préexistante. Brito *et al.* (2002) ont aussi étudié l'effet d'un champ magnétique sur l'orientation des cristaux de gallium mais n'ont pas observé d'effet mesurable.

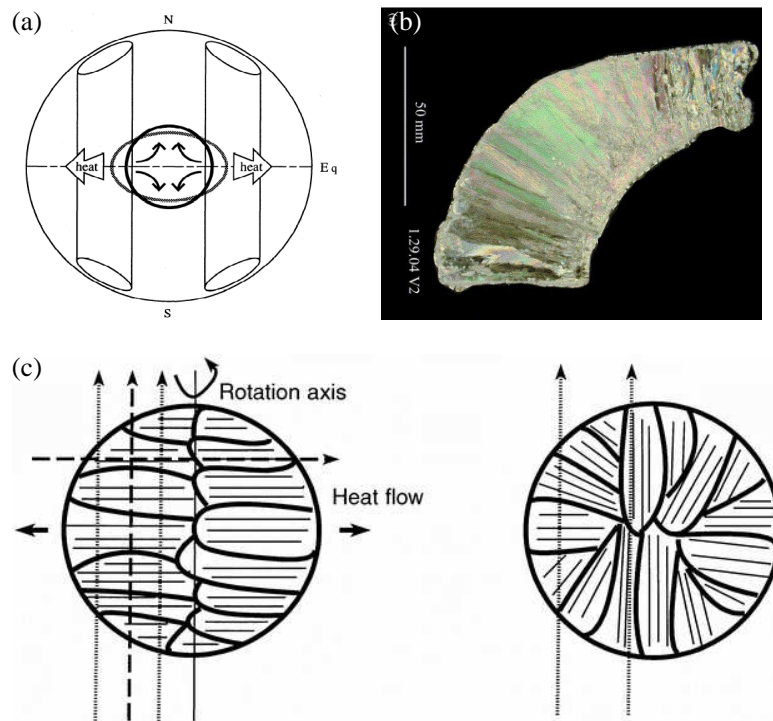


Figure 1.11 – Quelques modèles géodynamiques proposés pour expliquer le développement de l'anisotropie élastique de la graine. (a) croissance préférentielle à l'équateur et relaxation visqueuse vers l'équilibre isostatique (Yoshida *et al.*, 1996). (b) vérification expérimentale de l'effet de la rotation sur la croissance de la graine par Bergman *et al.* (2005). (c) orientation des dendrites parallèlement au flux de chaleur, supposé rendu anisotrope par la rotation Bergman (1997).

L'orientation de l'anisotropie de la graine peut aussi s'expliquer si le champ magnétique joue un rôle dans sa formation.

En se référant au comportement magnétique de plusieurs métaux *hcp*, Karato (1993) a proposé que le fer ϵ pouvait être paramagnétique aux conditions P/T de la graine, et présenter une anisotropie de susceptibilité paramagnétique. Si la croissance de la graine implique la nucléation ou la croissance à partir de germes de cristaux dans le liquide, suivie de leurs sédimentation à la surface de la graine, il est envisageable que ces cristaux s'orientent dans le champ magnétique ambiant. Une texture reflétant la géométrie du champ magnétique à proximité de l'ICB peut alors se développer. Les propriétés magnétiques du fer aux conditions de la graine sont cependant mal connues ; les travaux de Söderlind *et al.* (1996) suggèrent que le fer *hcp* est non magnétique aux conditions de la graine. Ce mécanisme ne peut pas s'appliquer si la phase stable du fer dans la graine est cubique, les minéraux cubiques ne présentant pas d'anisotropie magnétique (Karato, 1993).

Une autre possibilité est qu'un écoulement de grande échelle dans la graine soit engendré par la force de Lorentz $\mathbf{f}_L = \mathbf{j} \times \mathbf{B} = \mu_0^{-1} (\nabla \times \mathbf{B}) \times \mathbf{B}$, où \mathbf{j} est le vecteur densité de courant, \mathbf{B} le champ magnétique et μ_0 la perméabilité du vide. La géométrie du forçage dépend de celle du champ magnétique ; pour illustrer notre propos, nous considérerons une forme de champ très simple choisie par Buffett & Wenk (2001), inspirée de résultats de dynamos numériques prédisant un champ toroïdal fort. Buffett & Wenk (2001) supposent le champ composé d'une composante verticale B_z constante dans l'espace et d'une composante azimutale B_ϕ de la forme $B_\phi = B_\phi(r_{ic}) (r/r_{ic})^2 \sin \theta \cos \theta$. La force de Lorentz découlant de ce champ peut s'écrire

$$\mathbf{f}_L = \left\{ -\nabla \left(\frac{B_\phi^2}{2\mu_0} \right) - \frac{B_\phi^2}{\mu_0 r} (\mathbf{e}_r + \cotan \theta \mathbf{e}_\theta) \right\} + \frac{B_\phi(r_{ic})B_z}{\mu_0 r_{ic}^2} r \sin \theta \mathbf{e}_\phi \quad (1.3)$$

où θ est la colatitude, r le rayon, r_{ic} le rayon de la graine, et \mathbf{e}_r et \mathbf{e}_θ des vecteurs unitaires pointant vers la direction radiale et azimutale respectivement. La force de Lorentz a une composante poloïdale, qui ne dépend que de B_ϕ , et une composante azimutale qui dépend du produit de B_ϕ et B_z .

Karato (1999) a ainsi proposé qu'un champ magnétique toroïdal fort pouvait induire un écoulement poloïdal dans la graine. Avec $B_\phi \sim 10^{-2} - 10^{-1}$ T et $\eta \sim 10^{16 \pm 1}$ Pa.s, Karato (1999) obtient un écoulement dont la vitesse typique est de l'ordre de 10^{-9} à 10^{-7} m.s $^{-1}$, soit plusieurs ordres de grandeur plus supérieure à la vitesse de cristallisation de la graine. Les contraintes déviatoriques associées sont suffisantes pour induire une texture. Buffett & Bloxham (2000) ont montré que l'écoulement calculé par Karato (1999) ne peut pas persister dans le cas probable où la graine est stratifiée stablement en densité. Un écoulement poloïdal tel celui calculé par Karato (1999) déforme les surfaces isothermes, ce qui induit une force de flottabilité qui s'oppose à l'écoulement. Le nombre de Péclet $Pe = Ur_{ic}/\kappa$, où U est une vitesse typique de l'écoulement et κ la diffusivité thermique, est grand pour cet écoulement, de l'ordre de $10^{4 \pm 1}$, et la diffusion de la chaleur ne modifiera que très peu cette rétroaction. Un équilibre entre la force de Lorentz et les forces de flottabilité est atteint lorsque les surfaces isodensité sont défléchies d'une dizaine de mètres, mais Buffett & Bloxham (2000) montrent qu'un écoulement est toujours possible. La présence d'un champ magnétique fort implique que l'équilibre mécanique et l'équilibre thermodynamique à l'ICB ne peuvent pas être vérifiés

simultanément : en raison de la force de Lorentz, la figure d'équilibre hydrostatique de la graine s'écarte de la surface isopression qui correspond à la surface d'équilibre thermodynamique (température de cristallisation constante) de la graine. La compétition entre équilibre mécanique et thermique nourrit un (faible) écoulement localisé près de la surface de la graine.

Afin de s'affranchir du problème de la stratification en densité de la graine, Buffett & Wenk (2001) considèrent la composante azimutale de la force de Lorentz, qui résulte de l'interaction entre le champ toroïdal et le champ poloïdal. L'amplitude de B_z étant probablement significativement plus faible que celle de B_ϕ , la composante azimutale de la force de Lorentz est plus faible que sa composante radiale (équation (1.3)). En revanche, la composante azimutale de la force de Lorentz génère un écoulement horizontal qui n'est donc pas affecté par une éventuelle stratification en densité. La composante azimutale de la force de Lorentz, intégrée sur le volume de la graine produit un couple qui doit entraîner la graine en rotation différentielle. Buffett & Wenk (2001) supposent que le couplage gravitationnel avec les hétérogénéités de densité du manteau doit bloquer - ou au moins freiner - la graine au niveau de sa surface, ce qui induit un fort cisaillement sous l'ICB. En profondeur, la dépendance radiale de la force de Lorentz assure aussi un cisaillement important qui peut générer une texture significative. Si la phase stable du fer est ϵ , l'écoulement tend à aligner l'axe c perpendiculairement à l'axe N-S (Buffett & Wenk, 2001), et ce mécanisme ne peut donc produire une anisotropie en accord qualitatif avec la sismologie que si l'axe c est lent (Steinle-Neumann *et al.*, 2001; Vočadlo, 2007).

Stevenson (1996)⁵ a suggéré un mécanisme de développement de l'anisotropie basé sur la croissance normale (croissance d'Ostwald) des grains de fer dans un champ de (faibles) contraintes anisotrope. En l'absence de contraintes suffisamment fortes pour induire la recristallisation sous contraintes du milieu, il est connu en métallurgie que la population de grains d'un matériau évolue naturellement avec le temps, les plus gros grains grandissant au dépend des petits afin de minimiser l'énergie interfaciale globale du milieu. Stevenson propose une extension de cette théorie dans laquelle un champ de contraintes anisotropes privilégie la croissance de grains dont le système cristallin est orienté dans une direction liée à la géométrie du champ de contraintes. Dans ce mécanisme, le degré d'alignement des cristaux dépend directement du temps passé sous contraintes et prédit donc une augmentation de l'anisotropie avec la profondeur. D'après Stevenson, le champ de contraintes induit par les marées, bien que faibles, pourrait être suffisant pour expliquer le degré d'anisotropie observé. Ce mécanisme devient en revanche inefficace en présence d'un champ de contraintes suffisamment fort pour que la recristallisation sous contrainte du milieu deviennent le mécanisme régissant l'évolution de taille de grains.

1.3.2 Écarts à la symétrie cylindrique

La structure fine de la graine telle que la voit la sismologie s'éloigne significativement de la structure cylindrique que tentent d'expliquer les modèles dynamiques d'anisotropie.

⁵Ce mécanisme, présenté à la session d'automne de l'AGU 1996, n'a pas fait l'objet de publication et il est difficile à la lecture de l'abstract seul d'avoir une idée précise de la réalité quantitative du modèle. L'idée est néanmoins intéressante et mérite d'être citée.

La réalité est sans-doute plus complexe.

L’observation la plus énigmatique est sans doute l’asymétrie hémisphérique de la couche isotrope (Garcia & Souriau, 2000; Niu & Wen, 2001). Une explication très élégante a été proposée par Sumita & Olson (1999, 2002) et Aubert *et al.* (2008) qui proposent que cette asymétrie soit liée à des hétérogénéités de grande échelle du flux de chaleur à la CMB. Même s’il est souvent difficile de différencier des anomalies thermiques d’anomalies chimiques par la sismologie, la structure thermique de la couche D’’ est probablement complexe. Un argument fort en faveur d’un flux présentant une forte variabilité spatiale est donnée par l’interprétation de réflecteurs dans la couche D’’ comme étant dû à des lentilles de post-perovskite (Lay *et al.*, 2006; van der Hilst *et al.*, 2007). Cette interprétation contraint directement le flux de chaleur et la température dans la couche D’’ (Hernlund *et al.*, 2005; Buffett, 2007; Monnereau & Yuen, 2007). Le fait que ces lentilles de post-perovskite ne soient observées que localement dans la couche D’’ plaide pour une forte variabilité du flux de chaleur à la CMB. Les expériences de Sumita & Olson (1999, 2002) et les calculs numériques de Aubert *et al.* (2008) (voir figure 1.12) suggèrent qu’un forçage thermique hétérogène à la CMB induit un flux de chaleur - et donc un taux de croissance - hétérogène à l’ICB. La géométrie de cette croissance hétérogène prédite par Sumita & Olson (1999, 2002) et Aubert *et al.* (2008) est compatible avec les observations sismologiques. Aubert *et al.* (2008) proposent d’expliquer la différence de propriétés sismiques entre les deux hémisphère par une différence de texture résultant de la différence de taux de cristallisation entre les deux hémisphères.

Ce modèle est difficilement conciliable avec la rotation différentielle éventuelle de la graine. Si l’on suppose un taux de rotation de l’ordre du degré par an, la graine fait un tour sur elle-même par rapport au manteau en 360 ans, un temps très petit comparé au temps de croissance de la graine. Pour un âge de la graine de l’ordre du milliard d’années, les 100 km et 400 km de couche isotrope se sont cristallisés en ~ 150 et ~ 500 My respectivement. Tout forçage s’écartant de la symétrie cylindrique devrait être moyenné par la rotation différentielle, et aucun écart significatif à la symétrie cylindrique ne devrait être observable. L’argument reste valide pour des taux de rotation significativement plus faibles que $1^\circ/\text{an}$ et la présence de cette asymétrie est difficilement compatible avec un taux de rotation différentielle observable par la sismologie, si la formation de cette couche est contrôlée par des processus externes à la graine. Une manière de résoudre ce paradoxe apparent est d’interpréter la rotation observée par la sismologie non pas comme une rotation différentielle stationnaire, mais comme une oscillation autour d’une position d’équilibre. Une autre possibilité est que cette asymétrie résulte non pas d’un couplage avec le noyau mais d’un processus interne à la graine (qui reste à découvrir...), auquel cas la structure 3D pourrait être relativement insensible à la rotation différentielle.

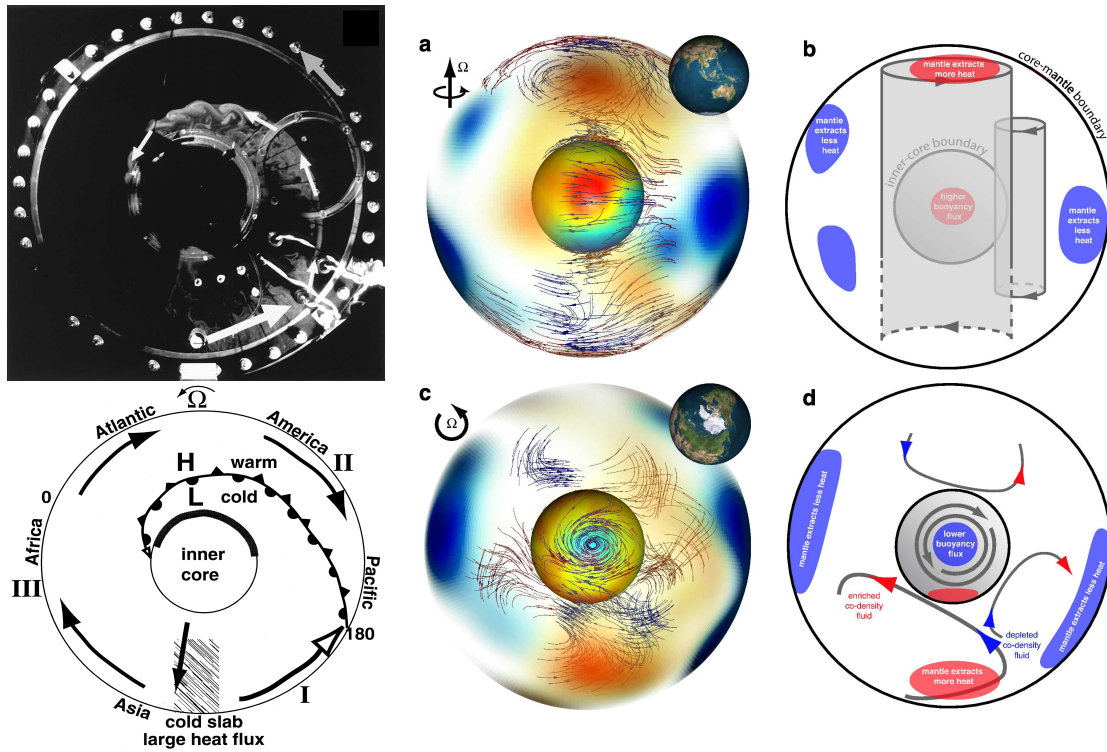


Figure 1.12 – Modèles de croissance asymétrique de la graine : modèle expérimental de convection en rotation rapide sous un flux de chaleur hétérogène à la CMB (colonne de gauche), par Sumita & Olson (1999, 2002), et modélisation numérique (à droite) par Aubert *et al.* (2008).

2 Régime de cristallisation de la graine

2.1 Introduction

Il ne fait aujourd’hui aucun doute que la graine cristallise à partir du noyau liquide en réponse au lent refroidissement de la Terre. Lors de la cristallisation, les éléments légers présents dans le noyau sont rejetés de manière préférentielle dans le liquide. Le flux de flottabilité associé au fractionnement des éléments légers a un rôle majeur dans le maintien de la convection dans le noyau et la génération du champ magnétique terrestre, mais peut aussi avoir de fortes conséquences sur la structure de la graine.

Il est bien connu en métallurgie que lors de la cristallisation d’un alliage, le fractionnement des solutés s’accompagne très souvent de la formation d’une zone biphasique, appelée *zone dendritique* où des dendrites solides baignent dans un liquide résiduel enrichi en soluté. La figure 2.1 montre une telle zone dendritique obtenue en cristallisant une solution de chlorure d’ammonium, un bon analogue de la cristallisation d’alliages métalliques. La formation de cette zone dendritique est expliquée (*e.g.* Mullins & Sekerka, 1963; Davis, 2001) par une instabilité du front de solidification, dite *instabilité morphologique*. Dans un alliage, cette instabilité est due au fractionnement du soluté lors de la cristallisation et à l’accumulation de celui-ci dans une couche limite à proximité de l’interface. La température de cristallisation étant le plus souvent une fonction décroissante de la concentration en soluté, la température de solidification est abaissée dans cette couche au point d’être éventuellement inférieure à la température réelle : le voisinage du front de solidification est alors surfondu. Le critère de surfusion peut s’écrire

$$G_T^\ell = \left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{i+} \leq \left. \frac{\partial T_s}{\partial z} \right|_{i+} = m_c G_c \quad (2.1)$$

où G_T^ℓ est le gradient de température dans le liquide à l’interface, G_c est le gradient de concentration en soluté, $m_c = \partial T_s / \partial c$ est la pente du liquidus, T_s la température de solidification et z représente la distance à l’interface, comptée positivement dans la phase liquide. Cet état hors équilibre ne persiste pas en général : la cristallisation partielle de cette zone, soit sous forme de dendrites, soit sous la forme de nucléation de cristaux en volume, ramène le système vers un état en équilibre thermodynamique. Un matériau pur peut être sujet à une instabilité morphologique tout à fait comparable s’il cristallise à partir d’un liquide surfondu.

Au début des années 80, Loper & Roberts (1981), puis Fearn *et al.* (1981) ont montré que la proximité de l’ICB était très probablement surfondue et ont suggéré en référence à la métallurgie et aux expériences analogues de Copley *et al.* (1970) que le régime de cristallisation de la graine devait être dendritique. La situation présente des différences avec celles rencontrées en laboratoire, la plus apparente étant l’effet de la pression sur la

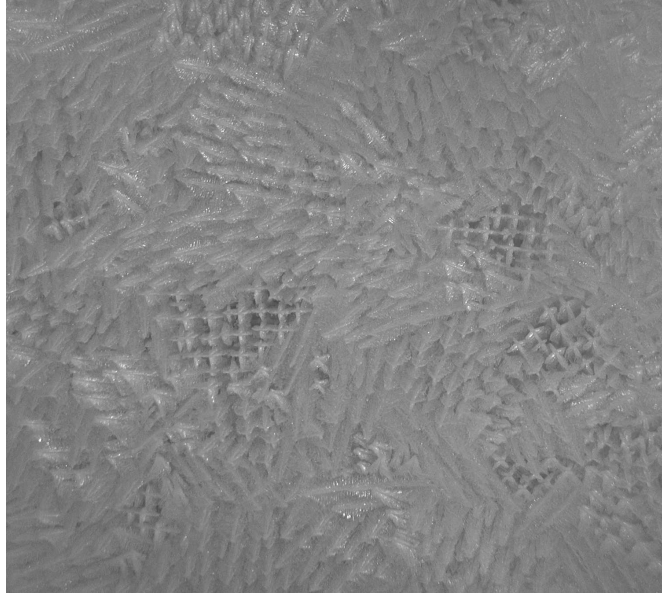


Figure 2.1 – Front de solidification dendritique cristallisé à partir d’une solution de chlorure d’ammonium, vu perpendiculairement à la surface moyenne. Le refroidissement de la solution a été effectué à la fois par la base du récipient et par le haut ; la convection thermique induite par le refroidissement par le haut a induit une orientation des grains beaucoup plus hétérogène que lorsque le refroidissement se fait de manière prédominante par conduction à travers la zone de mush. Le front de solidification est plan à quelques millimètres près. Chaque domaine défini par une même orientation des dendrites correspond à un grain. L’espacement interdendritique est de l’ordre d’un demi millimètre.

température de solidification, parfaitement négligeable en laboratoire, mais pas dans le noyau où le gradient de température de fusion induit par les variations de pression est du même ordre que le gradient de température. Le critère de surfusion peut alors être écrit, en supposant que T_s est une fonction de la concentration et de la pression,

$$G_T^\ell < m_p G_p + m_c G_c, \quad (2.2)$$

où $G_p = dp/dz = -\rho g$ est le gradient de pression et $m_p = \partial T_s / \partial p$ est la pente de Clapeyron. On peut réécrire ce critère sous la forme

$$G_T^\ell - m_p G_p < m_c G_c, \quad (2.3)$$

où $G_T^\ell - m_p G_p = \partial(T - T_s(p, c_0)) / \partial z$ est ce que l’on appellera par la suite le gradient de *saturation*. Les conditions thermo-chimiques à proximité d’un front de solidification plan dans le régime de solidification de la graine sont schématisées sur la figure 2.2. Le gradient de température à l’ICB est négatif et favorise la surfusion, ce qui rend la situation en partie analogue à celle de la cristallisation d’un liquide surfondu. $m_c G_c$ est positif et favorise aussi la surfusion, qui est en revanche limitée par l’effet du gradient de pression, $m_p G_p$ étant négatif. Dans les conditions de la graine, ce critère est très probablement vérifié (Loper & Roberts (1981); Fearn *et al.* (1981); voir aussi §2.3.2). Les conséquences sur la structure interne de la graine peuvent être importantes. Fearn *et al.* (1981) montrent qu’en raison du très faible gradient thermique dans la graine, cette zone dendritique pourrait s’étendre jusqu’au centre de la graine.

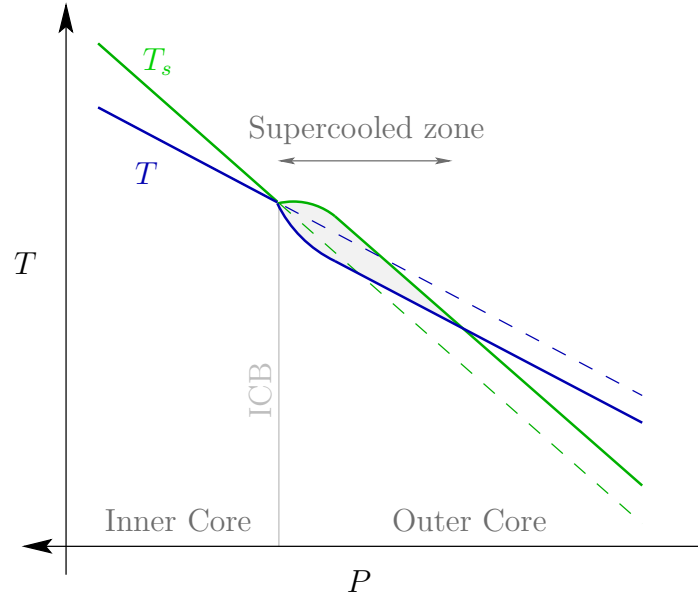


Figure 2.2 – Conditions thermo-chimiques à proximité d’un front de solidification plan dans le régime de solidification de la graine. En vert est représentée la température de solidification, et le géotherme est représenté en bleu.

Ce chapitre reprend en grande partie un article publié dans *Physics of the Earth and Planetary Science* (Deguen *et al.*, 2007), présenté en annexe. L’étude présentée ici présente quelques améliorations par rapport à ce qui est proposé dans l’article, mais surtout des conclusions plus nuancées. Après le rappel de quelques notions de cristallisation, on discutera des conditions thermo-chimiques à l’ICB avant de procéder à une analyse de stabilité linéaire du front de cristallisation. Dans une dernière sous-partie, on discutera des observations sismologiques prédisant la présence d’une couche stratifiée à la base du noyau et de la possible origine d’une telle couche.

2.2 Quelques notions fondamentales de solidification

2.2.1 Mélanges binaires - diagramme de phase

Dans tout ce qui suit, nous supposons que le noyau peut être modélisé comme un mélange binaire, composé d’un solvant dense riche en fer, auquel est additionné environ 10 % d’un élément plus léger qui fractionne lors de la cristallisation. Si l’on en croit les résultats d’Alfè *et al.* (2002a,c), des trois éléments légers les plus probablement présents dans le noyau, Si, S et O, seul l’oxygène partitionne de manière significative. Avec un tel modèle, le solvant serait donc un mélange Fe-Ni-S-Si et le soluté l’oxygène. Nous supposons que les variations de composition restent faibles, ce qui nous permet d’utiliser un diagramme de phase linéarisé tel que celui présenté sur la figure 2.3, où le liquidus et le solidus sont supposés être linéaire, ce qui implique que le coefficient de partage k de l’élément léger est constant. Le fait que la graine soit plus dense que le noyau liquide, même après correction du changement de densité dû au changement de phase, nous indique que le coefficient de partage d’au moins une partie des éléments légers

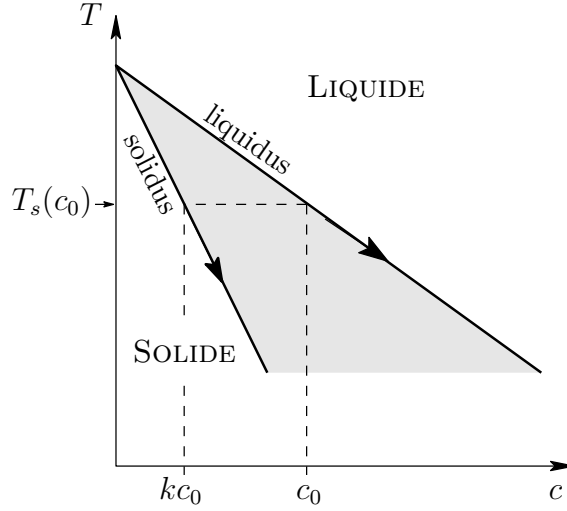


Figure 2.3 – Diagramme de phase linéarisé.

présents dans le noyau est inférieur à 1, en bon accord avec les prédictions théoriques de Alfè *et al.* (2002a,c). Le fait que $k < 1$ implique aussi que la pente du liquidus, définie comme

$$m_c = \frac{\partial T_s}{\partial c} \quad (2.4)$$

où T_s est la température de cristallisation et c la concentration en éléments légers, doit nécessairement être négative. L'implication géodynamique la plus importante est sans doute que le rejet préférentiel de ces éléments légers fournit un flux de flottabilité important qui contribue à maintenir la convection dans le noyau et à générer le champ magnétique terrestre. Du point de vue de la solidification, le fractionnement est tout aussi capital. Il implique un enrichissement en soluté à proximité de l'interface et donc une diminution de la température de cristallisation au voisinage du front de solidification, jusqu'à éventuellement rendre ce liquide surfondu.

2.2.2 Condition de Stefan et conservation du soluté à l'interface

La solidification ou la fusion concerne en premier lieu l'évolution de l'interface séparant le liquide du solide. L'avancée de cette interface nécessite l'extraction de la chaleur latente libérée par le changement de phase, et s'accompagne d'une redistribution du soluté entre les deux phases. Chaleur et matière sont échangées entre les deux phases et l'évolution du front de solidification est contrôlée par les flux de chaleur et de soluté de part et d'autre de l'interface. Des équations de conservation de l'énergie et du soluté peuvent être dérivées, par exemple en effectuant un bilan d'énergie et de soluté sur un volume de contrôle englobant l'interface, dont on fait tendre ensuite l'épaisseur vers 0.

La conservation de l'énergie s'écrit ainsi, pour une interface plane,

$$\rho_s L V_n = (\mathbf{q}^s - \mathbf{q}^\ell) \cdot \mathbf{n} \quad (2.5)$$

où L est la chaleur latente massique, V_n la vitesse d'avancée de l'interface dans la direction \mathbf{n} normale à elle-même, et \mathbf{q}^s et \mathbf{q}^ℓ les flux de chaleur à l'interface dans le solide et

le liquide, dans le référentiel lié à l'interface. Cette condition, souvent appelée condition de Stefan, énonce simplement que le taux de cristallisation est contrôlé par la capacité du système à évacuer la chaleur latente libérée par la cristallisation. Si l'on néglige les couplages entre transport chimique et thermique, ainsi que la barodiffusion, ce que l'on fera dans la suite, les flux de chaleur sont donnés par la loi de Fourier, $\mathbf{q}^{s,\ell} = k^{s,\ell} \nabla T|^{s,\ell}$, k^s et k^ℓ étant les conductivités thermiques dans le solide et le liquide.

Si maintenant l'interface n'est pas plane, une situation qui nous intéressera dans la suite, l'énergie interfaciale liée à la courbure finie de l'interface doit être prise en compte, et on peut montrer que la condition de Stefan s'écrit maintenant

$$(\rho_s L - \gamma \mathcal{K}) V_n = (\mathbf{q}^s - \mathbf{q}^\ell) \cdot \mathbf{n} \quad (2.6)$$

où γ est la tension de surface de l'interface solide-liquide, et \mathcal{K} la courbure (*e.g.* Davis, 2001). Si la courbure est positive (une bosse sur l'interface), une partie de la chaleur latente libérée par la cristallisation est absorbée par la création d'interface. À flux constant, l'effet est équivalent à une diminution de la chaleur latente efficace, et se traduit par une vitesse de cristallisation plus grande. Dans un creux au contraire, l'effet est opposé.

La conservation du soluté au niveau de l'interface permet d'écrire une condition analogue pour la concentration en soluté

$$(k - 1)c_i V_n = -\mathbf{i}^\ell \cdot \mathbf{n} = D \nabla c|^\ell \cdot \mathbf{n} \quad (2.7)$$

où l'on a négligé le transport de soluté dans la phase solide. On suppose là encore l'absence de couplage entre transport diffusif de chaleur et de matière, ce qui permet d'écrire le flux de soluté \mathbf{i} grâce à la loi de Fick, $\mathbf{i} = -D \nabla c$. Dans cette équation, c (sans indice) dénote la concentration de soluté dans le liquide, c_i la concentration dans le liquide à l'interface, et D la diffusivité chimique du soluté. Il est à noter que l'équation de conservation du soluté et la condition de Stefan sont couplées *via* la vitesse de cristallisation.

2.2.3 Équation de Clapeyron, effet de Gibbs-Thomson et pente du liquidus

Une condition additionnelle est donnée par le fait que l'interface solide/liquide est au point de fusion. Pour une interface plane séparant deux phases d'un matériau pur en équilibre thermodynamique dans un milieu isobare, la définition du point de fusion ne présente aucune ambiguïté. Dans le cas présent, nous considérerons un mélange binaire, dans un milieu où les variations de pression jouent un rôle, et où de surcroît on permettra à l'interface de ne pas être plane à une échelle où le rayon de courbure peut modifier la température d'équilibre de l'interface.

On se place dans un état d'équilibre thermodynamique local, où le potentiel chimique de chaque substance présente dans le milieu peut être considéré comme constant, $\mu^s = \mu^\ell$. Considérons tout d'abord un matériau pur, initialement à l'équilibre à un état de référence (T_s^0, p_0) , où la pression est supposée égale dans les deux phases, que l'on comprime vers un nouvel état d'équilibre. Puisque dans le nouvel état d'équilibre, le potentiel chimique des deux phases doit à nouveau être égal, la variation de potentiel chimique au cours de la transformation doit être identique dans les deux phases, $d\mu^s = d\mu^\ell$. On en déduit

$$\left. \frac{\partial \mu^s}{\partial T} \right|_p dT + \left. \frac{\partial \mu^s}{\partial p} \right|_T dp_s = \left. \frac{\partial \mu^\ell}{\partial T} \right|_p dT + \left. \frac{\partial \mu^\ell}{\partial p} \right|_T dp_l. \quad (2.8)$$

Dans le nouvel état d'équilibre, la pression p_s dans la phase solide peut être différente de la pression p_l dans la phase liquide (par exemple, comme nous le considérerons plus tard, en présence de tension de surface). En notant que

$$\left. \frac{\partial \mu^{s,l}}{\partial T} \right|_p = -s_{s,l} \quad \text{et} \quad \left. \frac{\partial \mu^{s,l}}{\partial p} \right|_T = v_{s,l} = \frac{1}{\rho_{s,l}}, \quad (2.9)$$

on obtient la variation de température lors de cette transformation, égale à la variation de température de solidification dT_s ,

$$dT_s = \frac{\Delta v_f}{\Delta s_f} dp_l - \frac{1}{\rho_s \Delta s_f} d(p_s - p_l) \quad (2.10)$$

où $\Delta v_f = v_l - v_s$ et $\Delta s_f = s_l - s_s$ sont les différences de volume molaire et d'entropie molaire entre la phase liquide et la phase solide.

Si l'y a pas de discontinuité de pression à travers l'interface, $p_s = p_l = p$, on retrouve directement l'équation de Clapeyron, qui donne la variation de température de solidification avec la pression (la *pente de Clapeyron*, notée m_p)

$$m_p \equiv \left. \frac{\partial T_s}{\partial p} \right|_c = \frac{\Delta v_f}{\Delta s_f} = \frac{T_s}{L} \frac{\rho^s - \rho^\ell}{\rho^s \rho^\ell}, \quad (2.11)$$

où L est la chaleur latente *massique*. Pour la plupart des matériaux, et en particulier le fer, $\rho_s > \rho_l$ et la température de solidification augmente avec la pression (deux exceptions notables sont l'eau et le gallium).

Si l'interface n'est plus supposée plane, il existe une discontinuité de pression induite par la différence d'énergie de surface entre les deux phases : la tension de surface induit une surpression du côté convexe de l'interface. Cette discontinuité de pression est donnée par l'équation de Laplace

$$p_s - p_l = \gamma \mathcal{K} \quad (2.12)$$

où γ est la tension de surface de l'interface solide-liquide, et \mathcal{K} la courbure, définie ici comme étant positive lorsque le centre de courbure est dans la phase solide. La tension de surface induit une surpression dans la phase solide si la surface de celle-ci est convexe ($\mathcal{K} > 0$).

En insérant l'équation de Laplace dans la relation (2.10), on obtient

$$dT_s = m_p dp_l - \Gamma d\mathcal{K} \quad (2.13)$$

où Γ , défini par

$$\Gamma \equiv -\frac{\partial T_s}{\partial \mathcal{K}} = \frac{\gamma T_s}{\rho_s L}. \quad (2.14)$$

est le paramètre de Gibbs-Thomson, généralement de l'ordre de 10^{-7} K.m pour la plupart des métaux. La température de solidification est ainsi diminuée si la phase solide est convexe ($\mathcal{K} > 0$) et augmentée si la phase solide est concave ($\mathcal{K} < 0$), et ce d'autant plus que le rayon de courbure est petit. \mathcal{K} est égale à la divergence du vecteur \mathbf{n} normal unitaire à la surface h , $\mathcal{K} = \nabla \cdot \mathbf{n}$, et l'on peut écrire

$$\mathbf{n} = \frac{1}{\sqrt{1 + (\partial_x h)^2 + (\partial_y h)^2}} \begin{pmatrix} -\partial_x h \\ -\partial_y h \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \mathcal{K} = \nabla \cdot \mathbf{n} \simeq -\frac{\nabla^2 h}{\sqrt{1 + (\partial_x h)^2 + (\partial_y h)^2}}. \quad (2.15)$$

L'analyse présentée ci-dessus peut être facilement étendue au cas de matériaux non purs. Dans la suite, nous supposons que la composition du noyau peut être approchée par un mélange binaire composée de fer et d'un élément léger indéterminé, et on se restreindra donc au cas d'un mélange binaire. Le potentiel chimique du constituant majoritaire (le solvant, ici le fer) dépend maintenant de la concentration molaire c en soluté (ici l'élément léger), $\mu = \mu(T, p, c)$,

$$\left. \frac{\partial \mu^s}{\partial T} \right|_{p,c} dT + \left. \frac{\partial \mu^s}{\partial p} \right|_{T,c} dp_s + \left. \frac{\partial \mu^s}{\partial c} \right|_{T,p} dc_s = \left. \frac{\partial \mu^l}{\partial T} \right|_{p,c} dT + \left. \frac{\partial \mu^l}{\partial p} \right|_{T,c} dp_l + \left. \frac{\partial \mu^l}{\partial c} \right|_{T,p} dc_l, \quad (2.16)$$

dont on déduit, en supposant constant le coefficient de partage $k = c_s/c_l$,

$$dT_s = m_p dp_l - \Gamma d\mathcal{K} + m_c dc_l \quad (2.17)$$

où

$$m_c \equiv \left. \frac{\partial T_s}{\partial c} \right|_{T,p} = \frac{1}{\Delta s_f} \left(\left. \frac{\partial \mu^l}{\partial c} \right|_{T,p} - k \left. \frac{\partial \mu^s}{\partial c} \right|_{T,p} \right) \quad (2.18)$$

est la pente du liquidus. On peut estimer m_c si l'on suppose que le mélange est idéal, pour lequel le potentiel chimique est alors lié à la concentration molaire par $\mu_X = \mu_X^0 + RT \ln c_X$, où μ_X^0 est le potentiel chimique du corps X pur à la pression considérée, et $R = 8.314 \text{ J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$ la constante des gaz parfaits. Pour le fer, en particulier,

$$\mu_{\text{Fe}} = \mu_{\text{Fe}}^0 + RT \ln c_{\text{Fe}} = \mu_{\text{Fe}}^0 + RT \ln (1 - c) \quad (2.19)$$

et

$$\left. \frac{\partial \mu_{\text{Fe}}^{s,l}}{\partial c} \right|_{T,p} = \frac{RT_s}{1 - c_{s,l}}. \quad (2.20)$$

En insérant (2.20) dans (2.18) et en développant les fractions de $c_{s,l}$, on obtient, au premier ordre en c_l ,

$$m_c \simeq (1 - k) \frac{RT_s}{\Delta s_f} = (1 - k) \frac{RT_s^2}{M_{\text{Fe}} L}. \quad (2.21)$$

où M_{Fe} est la masse molaire du fer. Pour un mélange riche en fer dans les conditions de la graine, cette relation prédit $m_c \sim (1 - k) \times 50 \text{ K.mol}\%^{-1}$. Cela correspond à une dépression de la température de cristallisation de l'ordre de 500 K pour 10 mol% d'élément léger ayant un faible coefficient de partage.

En supposant que le système s'éloigne peu de l'état de référence ($p_0, c_0, \mathcal{K} = 0$), on déduit de (2.17) une équation linéarisée pour T_s , appelée équation de Gibbs-Thomson, généralisée ici pour prendre en compte l'effet de la pression,

$$T_s = T_s^0 + m_c(c - c_0) + m_p(p_l - p_0) - \Gamma \mathcal{K} \quad (2.22)$$

que l'on utilisera ultérieurement comme condition limite. On peut si nécessaire relaxer l'hypothèse d'équilibre thermodynamique en introduisant un terme de surfusion cinétique, fonction croissante de la vitesse de cristallisation. Les métaux présentent en général de très faibles degrés de surfusion cinétique, et au taux de cristallisation extrêmement faible de la graine, l'écart à l'équilibre thermodynamique est très probablement négligeable.

2.2.4 Transport de la chaleur et du soluté

La condition de Stefan et la conservation du soluté à l'interface montrent que le taux de cristallisation est couplé au transport de la chaleur et du soluté dans le solide et le liquide. Dans le liquide, on se place dans une couche limite diffusive, à proximité immédiate du front de cristallisation, telle que l'on puisse négliger tout écoulement. On supposera donc un transport uniquement diffusif au voisinage du front de solidification. On néglige de plus tout couplage entre flux de chaleur et de soluté, ce qui permet d'obtenir la forme classique de l'équation de diffusion de la chaleur, que ce soit dans le solide ou le liquide

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa^{s,\ell} \nabla^2 T + H^{s,\ell}, \quad (2.23)$$

où $H^{s,\ell}$ est la production de chaleur radiogénique.

On suppose la diffusion du soluté dans la phase solide suffisamment lente pour que la concentration c^s dans le solide puisse être considérée comme constante et homogène aux échelles de temps et d'espace considérées. Dans le liquide en revanche, la conservation du soluté donne une équation de diffusion qui s'écrit, en négligeant une fois de plus tout couplage avec la thermique,

$$\frac{\partial c}{\partial t} - V \frac{\partial c}{\partial z} = D \nabla^2 c. \quad (2.24)$$

On se ramène ensuite, pour des raisons de commodité mathématique, à un référentiel \mathcal{R}_z où le front de solidification est fixe, en effectuant le changement de variable $z = r - r_{ic} \simeq r - r_{ic}(t=0) - Vt$, où l'on a linéarisé la croissance de la graine. Les dérivées temporelle dans les référentiels \mathcal{R}_r et \mathcal{R}_z sont liées par

$$\left. \frac{\partial}{\partial t} \right|_r = \left. \frac{\partial}{\partial t} \right|_z + \left. \frac{\partial z}{\partial t} \right|_r \left. \frac{\partial}{\partial z} \right|_t = \left. \frac{\partial}{\partial t} \right|_z - V \left. \frac{\partial}{\partial z} \right|_t. \quad (2.25)$$

On obtient alors, dans le nouveau référentiel,

$$\frac{\partial T}{\partial t} - V \frac{\partial T}{\partial z} = \kappa^{s,\ell} \nabla^2 T + H^{s,\ell} \quad (2.26)$$

et

$$\frac{\partial c}{\partial t} - V \frac{\partial c}{\partial z} = D \nabla^2 c \quad (2.27)$$

dans le liquide.

2.3 Énergétique du noyau et cristallisation de la graine

2.3.1 Bilan énergétique du noyau

Il est très généralement accepté que la graine cristallise en réponse au lent refroidissement du noyau, dicté par le flux de chaleur à la CMB. Le taux de croissance de la graine et son histoire peuvent ainsi être calculés à partir du bilan d'énergie du noyau. Ce bilan peut être déduit de manière rigoureuse de l'écriture des équations de conservation de

l'énergie cinétique, de l'énergie magnétique et de l'énergie interne (*e.g.* Labrosse *et al.*, 2001; Gubbins *et al.*, 2004; Nimmo, 2007).

Les termes de production de chaleur les plus importants dans ce bilan sont le refroidissement séculaire Q_s , la chaleur latente libérée par la cristallisation de la graine, Q_L , et un terme, appelé énergie gravitationnelle Q_g qui correspond à l'énergie dissipée par effet joule et frottement visqueux par la convection solutale (égale à l'énergie gravitationnelle libérée par la redistribution des éléments légers), et éventuellement la chaleur radiogénique Q_R , libérée par la désintégration d'isotopes radioactifs (^{40}K , mais peut être aussi les isotopes radioactifs de l'uranium et du thorium, ^{235}U , ^{238}U et ^{232}Th (*e.g.* Labrosse *et al.*, 2001)). Ces sources sont équilibrées par le flux de chaleur à la CMB, Q_{cmb} ,

$$Q_{\text{cmb}} = Q_s + Q_L + Q_g + Q_R. \quad (2.28)$$

Q_s , Q_L et Q_g sont liés directement au taux de croissance de la graine \dot{r}_{ic} . Le terme de refroidissement séculaire s'écrit simplement

$$Q_s = -C_p \frac{d\bar{T}}{dt} \quad (2.29)$$

où $C_p = V_c \rho_c c_p$ est la capacité calorifique totale du noyau, V_c est le volume du noyau, c_p la capacité calorifique massique du noyau et ρ_c la densité moyenne du noyau. Q_s est liée à la croissance de la graine par le fait que l'ICB doit être au point de fusion. La vigueur de la convection dans le noyau permet de le supposer isentrope, le profil de température dans le noyau suivant alors un adiabat ancré à l'ICB. Le taux de refroidissement est alors lié au taux de croissance de la graine par la relation

$$\frac{d\bar{T}}{dt} = A \left[\frac{\partial T_s}{\partial c} \frac{dc}{dr_{\text{ic}}} + \left(\frac{\partial T_s}{\partial r} - \frac{\partial T_{\text{ad}}}{\partial r} \right) \right] \frac{dr_{\text{ic}}}{dt}, \quad (2.30)$$

que l'on peut par exemple comprendre à l'aide de la figure 2.4. Dans cette équation, A est un coefficient numérique d'ordre 1 - Nimmo (2007) l'estime à ~ 1.35 - qui prend en compte le fait que le taux de refroidissement local varie avec le rayon (*i.e.* deux adiabats ancrés à deux température différentes ne sont pas parallèles). c est la concentration en éléments légers dans le noyau liquide, le premier terme dans la parenthèse correspondant à l'effet de l'évolution chimique du noyau sur la température de cristallisation, qui tend à diminuer celle-ci et par conséquent à ralentir la croissance de la graine. Le deuxième terme montre la sensibilité du taux de croissance de la graine à la différence entre les variations avec la pression de l'adiabat et de la température de cristallisation (la pente de Clapeyron). Si adiabat et courbe de cristallisation étaient parallèles, le noyau entier cristalliserait sans chute de température. Si au contraire dT_s/dp est grand comparé à dT_{ad}/dp , le refroidissement du noyau doit être important pour permettre la cristallisation de la graine. Ces deux pentes étant du même ordre, leur différence est très sensible aux incertitudes, ce qui a des répercussions importantes sur l'histoire thermique du noyau et de la graine.

Le terme thermique peut être réécrit comme

$$\frac{\partial T_s}{\partial r} - \frac{\partial T_{\text{ad}}}{\partial r} = -\rho g_{\text{ic}} \left(\frac{\partial T_s}{\partial p} - \frac{\partial T_{\text{ad}}}{\partial p} \right) = -\rho g' (m_p - m_{\text{ad}}) r_{\text{ic}} \quad (2.31)$$

où l'on a tiré parti du fait que la gravité varie de manière presque linéaire dans la graine, $g' = dg/dr$, et où on note m_p la pente de Clapeyron et m_{ad} le gradient adiabatique. m_p

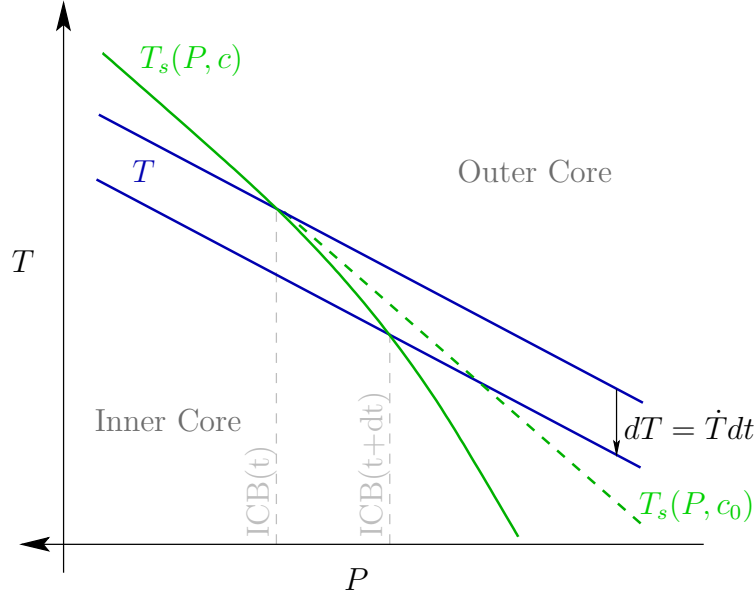


Figure 2.4 – Courbes T_{ad} et T_s en fonction de P . Inspiré de Gubbins *et al.* (2003)

et m_{ad} pouvant être considéré comme constants sur l'intervalle de pression de la graine, le terme thermique est au premier ordre proportionnel à r_{ic} . L'évolution chimique du noyau liée à la cristallisation de la graine peut être estimée à partir de l'équation de Rayleigh, $c(t) = c_0[1 - M_g(t)/M_0]^{k-1}$, où c_0 est la concentration initiale du noyau, $M_g(t)$ la masse de la graine au temps t , M_0 la masse du noyau et k le coefficient de partage solide/liquide de l'élément considéré. On en déduit qu'au premier ordre, $\dot{c} \propto r_{ic}^2$. Avec les valeurs choisies par Nimmo (2007) et l'estimation de $m_c = dT_s/dc$ par Alfè *et al.* (2002a), le terme lié à l'évolution chimique est légèrement plus grand que le terme lié au gradient de pression aujourd'hui. En revanche, de part leur dépendance différente en r_{ic} , l'effet de l'évolution chimique du noyau a été beaucoup plus faible dans le passé.

Le terme de chaleur latente s'exprime de manière immédiate comme

$$Q_L = 4\pi r_{ic}^2 \rho^s L \frac{dr_{ic}}{dt} \quad (2.32)$$

où L est la chaleur latente. Le terme d'énergie gravitationnelle s'écrit

$$Q_g = \frac{8\pi^2}{3} \mathcal{G} \Delta \rho \rho_c r_c^2 r_{ic}^2 \left(\frac{3}{5} - \left(\frac{r_{ic}}{r_c} \right)^2 \right) \frac{dr_{ic}}{dt} \quad (2.33)$$

où $\Delta \rho$ est la part du saut de densité à l'ICB due à la différence de composition chimique entre graine et noyau, r_c le rayon du noyau et \mathcal{G} la constante de gravitation universelle (*e.g.* Buffett *et al.* (1996); Labrosse (2003); voir l'annexe de Buffett *et al.* (1996) pour une démonstration de cette expression). Ces deux termes augmentent avec le rayon de la graine et sont négligeables au début de l'histoire de la graine.

Si on néglige la chaleur latente et l'énergie gravitationnelle dans le bilan de chaleur, ainsi que l'évolution de la température de cristallisation avec l'enrichissement du noyau en éléments légers, on obtient

$$Q_{cmb} = C_p A (m_{ad} - m_p) \rho_c g' r_{ic} \frac{dr_{ic}}{dt} \quad (2.34)$$

dont on en déduit

$$r_{ic} = \left[\frac{2Q_{cmb}}{\rho_c C_p A (m_{ad} - m_p) g'} \right]^{1/2} \sqrt{t}. \quad (2.35)$$

L'hypothèse est justifiée au début de l'histoire de la graine où la chaleur latente et l'énergie gravitationnelle sont petites, mais l'est moins aujourd'hui. Cette simplification n'est pas justifiable si l'on étudie quantitativement l'évolution du noyau, mais permet d'obtenir une solution analytique pratique, donnant un taux de cristallisation raisonnable. En particulier, l'hypothèse d'une croissance en \sqrt{t} de la graine permet d'obtenir une expression analytique du géotherme dans la graine qui nous sera utile dans la suite.

2.3.2 Conditions thermo-chimiques à proximité de l'ICB

Contrairement aux cas académiques traités le plus souvent, où le taux de croissance est essentiellement limité par le transfert de chaleur à travers le solide, ou imposé par la translation du milieu dans un profil thermique imposé, et où les champs de température et de soluté sont supposés diffusifs, la croissance de la graine est contrôlée par le transfert convectif de chaleur par le noyau liquide. On négligera ici l'effet sur l'évolution thermique du noyau de la chaleur latente, de l'énergie gravitationnelle et du flux en provenance de la graine. La croissance de la graine est alors en \sqrt{t} , et, dans ce cas particulier, on peut trouver une solution analytique approchée du profil de température dans la graine au cours du temps. Le calcul, décrit dans Deguen & Cardin (2009) (annexe pages 162-164), donne le profil de température en fonction du temps,

$$T(r) = \frac{\dot{T}_s}{1 + \tau_\kappa / \tau_{ic}} \left(\frac{r^2}{6\kappa} + t \right) + T_s(0), \quad (2.36)$$

duquel on déduit une expression du gradient de température à l'ICB dans la phase solide en fonction du gradient de température de solidification

$$G_T^s = \frac{1}{1 + \tau_{ic} / \tau_\kappa} \left. \frac{\partial T_s}{\partial r} \right|_{icb} = \frac{1}{1 + \tau_{ic} / \tau_\kappa} m_p G_p = \Lambda m_p G_p \quad (2.37)$$

où r_{ic}^* est le rayon actuel de la graine, τ_{ic} l'âge de la graine, et $\tau_\kappa = r_{ic}^{*2} / (6\kappa^s)$ est le temps de diffusion dans la graine. $\frac{\partial T_s}{\partial r} = m_p G_p$, où G_p est le gradient de pression à l'ICB, est le gradient de température de solidification. Le profil de température est proche du profil de température de solidification (son état initial) si l'âge de la graine est petit devant le temps diffusif, et tend vers un profil isotherme si au contraire le temps diffusif est petit devant l'âge de la graine. Pour $\tau_{ic} \sim 1$ Ga et $\kappa^s = 7 \times 10^{-6} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$, $\Lambda \sim 0.5$.

On en déduit, en utilisant la condition de Stefan, le gradient de température dans la phase liquide à l'ICB,

$$G_T^\ell = \lambda G_T^s - \frac{\rho_s L V}{k^\ell} = \lambda G_T^s + G_T^L = \lambda \Lambda m_p G_p + G_T^L \quad (2.38)$$

où λ est le rapport des conductivités thermiques, $\lambda = k^s / k^\ell$, et où

$$G_T^L = -\frac{\rho_s L V}{k^\ell}, \quad (2.39)$$

G_T^L étant la part du gradient de T dans le liquide à l'interface due au rejet de chaleur latente.

Pour des applications métallurgiques, le profil de concentration est en général supposé stationnaire, et obéit donc à l'équation

$$-V \frac{\partial c}{\partial z} = D \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \quad (2.40)$$

avec comme conditions aux limites l'équation de conservation à l'interface et la valeur de c à l'infini. La solution est

$$c = c_0 + c_0 \frac{1-k}{k} \exp\left(-\frac{z}{D/V}\right). \quad (2.41)$$

Le profil de concentration correspond à une couche limite diffusive d'épaisseur D/V , de l'ordre de 100 m dans le noyau, à comparer avec des valeurs de l'ordre du millimètre pour des expériences en laboratoire typique. Dans le noyau, il est très peu probable que le profil de concentration atteigne cet état stationnaire. Le nombre de Rayleigh estimé à partir de ce profil est très grand, de l'ordre de 10^{21} et la couche limite chimique doit donc se déstabiliser bien avant d'atteindre l'état quasi-stationnaire.

On peut étudier de manière semi-quantitative le comportement de cette couche en supposant que la couche grandit par diffusion jusqu'à être instable, se détruit alors puis se reconstruit à nouveau par diffusion. La couche limite grandit par diffusion, et son épaisseur à un temps t est $\delta \sim \sqrt{Dt}$. La conservation du soluté à l'interface s'écrit alors

$$(1-k)c_i V = D \frac{\partial c}{\partial z} \sim \sqrt{\frac{D}{t}}(c_i - c_0), \quad (2.42)$$

dont on en déduit

$$\Delta c = c_i - c_0 \sim \frac{(1-k)Vc_0}{\sqrt{D/t} - (1-k)V} \sim (1-k)Vc_0 \sqrt{\frac{t}{D}}. \quad (2.43)$$

pour des temps petits devant $D/V^2 \sim 0.3$ Ma. Le nombre de Rayleigh chimique de cette couche limite augmente avec le temps comme

$$Ra = \frac{\beta \Delta c g \delta^3}{\nu D} \sim \frac{\beta c_0 g V}{\nu} t^2 \quad (2.44)$$

et le nombre de Rayleigh critique est atteint au temps $t_c = \sqrt{(\nu Ra_c)/(\beta g V c_0)} \sim 5$ h, la période de pulsation de la couche limite, pour une épaisseur $\delta_c = [(D^2 \nu Ra_c)/(\beta g V c_0)]^{1/4} \sim 5$ mm. $\Delta c \sim 10^{-4}$ wt.% et c_i reste donc très proche de c_0 .

Contrairement au gradient thermique, le gradient chimique au niveau du front de solidification n'est pas fixé par le seul taux de cristallisation, mais dépend aussi de la structure de la couche limite. G_c est donné par l'équation de conservation de la masse au niveau de l'interface, qui le lie à la concentration à l'interface,

$$G_c = -(1-k)c_i \frac{V}{D}. \quad (2.45)$$

Dans le cas de la solution diffusive stationnaire, $c_i = c_0/k$ et le gradient vaut

$$G_c = -\frac{1-k}{k} c_0 \frac{V}{D}, \quad (2.46)$$

alors que dans le cas qui nous intéresse, $c_i \sim c_0$ et

$$G_c = (k - 1)c_0 \frac{V}{D}. \quad (2.47)$$

La différence n'est pas anodine, le coefficient de partage est probablement petit et le gradient chimique peut donc être considérablement plus faible que dans un cas purement diffusif. Par exemple, avec un coefficient de partage pour l'oxygène de l'ordre de 0.02, comme calculé par Alfè *et al.* (2002a), le gradient à l'ICB est environ 50 fois plus faible que pour la solution stationnaire.

Le liquide à proximité du front de solidification est surfondu si

$$G_T^\ell - m_c G_c < m_P G_P, \quad (2.48)$$

soit, en utilisant l'expression (2.38) trouvée pour G_T^ℓ ,

$$G_T^L - m_c G_c < (1 - \lambda\Lambda)m_P G_P. \quad (2.49)$$

En utilisant, les paramètres donnés dans le tableau 2.1, on obtient $G_T^L \sim -10^{-3} \text{ K.m}^{-1}$, $m_P G_P \sim -5 \times 10^{-4} \text{ K.m}^{-1}$, $\lambda \sim 1.3$ et Λ de l'ordre de 0.5 pour un âge de la graine de 1 Ga et donc $(1 - \lambda\Lambda)m_P G_P \sim 2 \times 10^{-4}$, près d'un ordre de grandeur plus faible que le terme thermique, déstabilisant. Il est donc probable que le flux de chaleur à l'ICB suffise à assurer, marginalement, la surfusion. Le terme chimique est plus grand de plusieurs ordres de grandeur que le terme stabilisant lié au gradient de pression, $m_c G_c \sim 10^{\pm 1} \text{ K.m}^{-1}$ si on suppose $m_c \sim -10^{1 \pm 1} \text{ K.wt}\%^{-1}$. La conclusion que la proximité de l'ICB est effectivement surfondue semble inévitable.

Table 2.1 –

penne de Clapeyron	m_P	$\simeq 10^{-8} \text{ K Pa}^{-1} \text{ }^a$
penne du liquidus	m_c	$-1 \text{ to } -100 \text{ K.wt.\%}^{-1}$
concentration en éléments légers	c_0	$2 \text{ to } 10 \text{ wt.\%}$
taux de croissance de la graine	V	$6 \times 10^{-12} \text{ to } 2 \times 10^{-11} \text{ m s}^{-1}$
température à l'ICB	T_{icb}	$5000 \text{ to } 6000 \text{ K } ^{a,c}$
capacité calorifique	c_P	$750 \pm 100 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$
chaleur latente	L	$600 \text{ }^c \text{ to } 1200 \text{ kJ kg}^{-1} \text{ }^a$
conductivité thermique dans le liquide	k^ℓ	$63 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1} \text{ }^d$
conductivité thermique dans le solide	k^s	$79 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1} \text{ }^d$
diffusivité thermique dans le liquide	κ^ℓ	$6 \times 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1} \text{ }^d$
diffusivité thermique dans le solide	κ^s	$7 \times 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1} \text{ }^d$
diffusivité chimique	D	$10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1} \text{ }^c$
énergie interfaciale	γ	$0.4 \pm 0.2 \text{ J m}^{-2} \text{ }^b$
coefficient de Gibbs-Thomson	Γ	$\simeq 2 \times 10^{-7} \text{ K.m}$

^a Anderson & Duba (1997).

^b Deguen *et al.* (2007).

^c Poirier (1994).

^d Stacey & Anderson (2001).

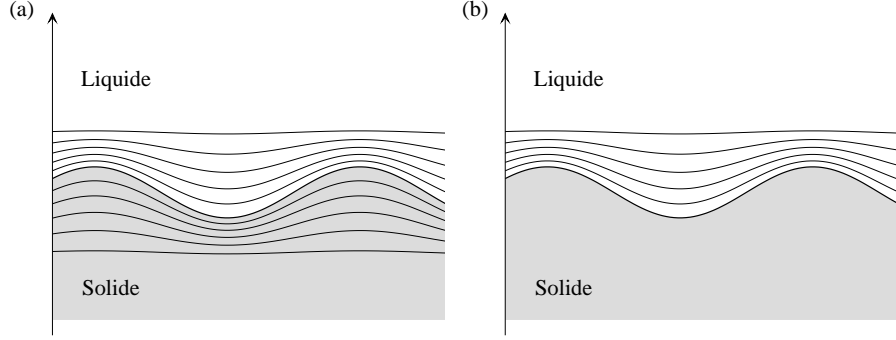


Figure 2.5 – Déformation des isothermes (en l’absence d’effet de Gibbs-Thomson) (a) et des surfaces iso-concentration (b) par une perturbation sinusoïdale du front de solidification.

2.4 Instabilité morphologique en présence d’un gradient de pression

2.4.1 Mécanisme de l’instabilité

On peut proposer un mécanisme de l’instabilité morphologique, en se basant sur la condition de Stefan et la conservation du soluté à travers l’interface.

Tant que l’on suppose le front de solidification plan, les isothermes et les surfaces iso-concentration sont planes et parallèles à l’interface. En revanche, si le front de cristallisation est perturbé, les surfaces isotherme et iso-concentration sont déformées en réponse aux nouvelles conditions limites (figure 2.5). Dans le liquide, les surfaces isothermes et iso-concentration sont compressées au niveau des bosses, et distendues au niveau des creux. Dans le solide, les isothermes sont au contraire compressés au niveau des creux ; de par l’hypothèse de diffusion chimique négligeable, les iso-concentration ne sont pas perturbées.

L’effet du champ de température dépend du sens du gradient de température moyen. Si la chaleur est diffusée du solide vers le liquide ($\frac{\partial T}{\partial z}|^s$ et $\frac{\partial T}{\partial z}|^\ell$ négatifs), comme c’est le cas pour la graine, ou pour un solide cristallisant à partir d’un liquide surfondu, le transfert de chaleur se trouve amplifié au niveau des bosses, et amoindri au niveau des creux, de telle manière que, d’après la condition de Stefan,

$$\rho_s L V_n = k^s \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_s - k^\ell \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_\ell,$$

la cristallisation se trouve accélérée au niveau des bosses et ralentie au niveau des creux : la perturbation de l’interface est amplifiée. Cette analyse suggère d’ores et déjà que le critère d’instabilité doit être plus compliqué que le critère de surfusion, puisque la perturbation du champ de température dans le solide semble jouer aussi un rôle.

Dans le cas le plus souvent rencontré en laboratoire, où la chaleur est transportée du liquide vers le solide, l’effet est opposé et la thermique est stabilisante. La direction du flux de chaleur est inversée et le taux de cristallisation se trouve diminué localement au niveau des bosses, et augmenté au niveau des creux, ce qui tend à ramener l’interface vers sa position initiale.

L'effet de la chimie est similaire à celui de la thermique, et est toujours déstabilisant, le soluté étant diffusé vers le liquide, et est limité à la phase liquide en raison du très grand contraste de diffusivité chimique entre phases liquide et solide. Dans le cas de la cristallisation de la graine, la thermique et la chimie ont donc tous deux un effet déstabilisant.

L'interface est en revanche stabilisée par l'effet de Gibbs-Thomson pour les petites longueurs d'ondes. L'équation de Gibbs-Thomson,

$$T^s = T_0^s + m_c(c - c_0) + m_p(p^l - p_0) - \Gamma\mathcal{K},$$

nous indique que la température de cristallisation est abaissée au niveau des bosses et augmentée au niveau des creux. Cela a pour effet de contrebalancer la perturbation du champ de température par la topographie en rapprochant la température de l'interface de celle du milieu environnant non perturbé. Si le rayon de courbure de l'interface est très petit, l'effet de Gibbs-Thomson peut même inverser le sens du flux de chaleur en abaissant la température au niveau des bosses en dessous de celle du liquide, et la rendant plus forte au niveau des creux que dans le solide. L'effet de Gibbs-Thomson est donc d'autant plus stabilisant que la longueur d'onde de la perturbation est petite. Le changement de température au sommet d'une bosse lié à l'effet de Gibbs-Thomson est équivalent au changement de température dans le profil de température thermique ambiant lorsque la longueur d'onde λ de la perturbation est telle que $\Delta T_\Gamma = -\Gamma\mathcal{K} \sim \Gamma h/\lambda^2$ est de l'ordre de $\Delta T \sim G_T h$, soit pour une longueur d'onde caractéristique, que l'on appellera *longueur capillaire thermique*,

$$\ell_\theta \sim \sqrt{\frac{\Gamma}{-G_T}}. \quad (2.50)$$

De la même manière, le changement de température de cristallisation induit par le profil de soluté ambiant est compensé par l'effet de Gibbs-Thomson pour une longueur d'onde de l'ordre de

$$\ell_\chi \sim \sqrt{\frac{\Gamma}{m_c G_c}}, \quad (2.51)$$

la *longueur capillaire compositionnelle*. Ce raisonnement suggère que l'interface doit être stable pour des longueurs d'ondes inférieures au minimum de ℓ_θ et ℓ_χ . (Notez que l'effet mécanique de la tension de surface (celui qui fait qu'une bulle de savon est sphérique par exemple), qui induit des contraintes qui pourraient en théorie ramener l'interface vers sa configuration plane, est négligeable comparé à l'effet thermique.)

Le gradient de pression a un effet similaire, bien qu'indépendant de la longueur d'onde. Dans le cas de la graine où la pression diminue à mesure que l'on s'écarte de l'interface, la température de solidification est plus faible au niveau des bosses qu'au niveau des creux, ce qui tend à amoindrir la perturbation du champ de température. Si le profil de température de l'état non perturbé est exactement égal au profil de température de fusion, une perturbation de l'interface ne perturbera pas le champ de température (si l'on fait abstraction de l'effet de Gibbs-Thomson). On peut donc anticiper que l'effet combiné du gradient de température et du gradient de pression sera déstabilisant si $G_T < m_p G_P$, c'est à dire si le liquide à proximité de l'interface est surfondu, et stabilisant si $G_T > m_p G_P$. Puisque $G_T - m_p G_P = \partial(T - T_s)/\partial z$, la variable pertinente pour décrire l'instabilité thermique semble être l'écart à la température de solidification, $T - T_s$,

que l'on appellera *sursaturation*. La longueur d'onde de coupure par l'effet de Gibbs-Thomson pour la thermique, en prenant en compte le gradient de pression, serait alors

$$\ell_\theta \sim \sqrt{\frac{\Gamma}{m_p G_P - G_T}}. \quad (2.52)$$

Avec les valeurs proposés dans la section précédente pour les gradients chimiques et thermiques, les longueurs capillaires à l'ICB sont de l'ordre de $\ell_\chi \sim 0.1 - 1$ mm et $\ell_\theta \sim 1$ cm.

2.4.2 Mise en équations

On effectue maintenant l'analyse de stabilité linéaire d'un front de cristallisation dans les conditions de solidification de la graine. L'analyse proposée ici s'inspire des travaux de Mullins & Sekerka (1963) qui ont été les premiers à proposer une analyse de stabilité d'un front de solidification. Des travaux ultérieurs y ont apportés quelques raffinement (voir Davis (2001) pour une review), certains étant pris en compte dans cette étude. L'apport majeur de cette étude est la prise en compte de l'effet d'un gradient de pression sur la température de fusion, qui est un effet parfaitement négligeable dans les situations rencontrées en métallurgie et en laboratoire, et qui n'avait donc pas été étudié jusqu'ici.

Une autre différence majeure entre les conditions de solidification de la graine et celles rencontrées en laboratoire ou dans l'industrie concerne les échelles de temps et d'espace. En laboratoire, la solidification est relativement rapide, avec des vitesses de cristallisation de l'ordre de 10^{-6} - 10^{-5} m.s⁻¹, et à ces vitesses, l'échelle spatiale de diffusion D/V , de l'ordre du millimètre, est une longueur pertinente pour le régime de cristallisation. À l'ICB, comme discuté dans le §2.3.2, la couche limite diffusive ne peut pas atteindre l'état quasi-stationnaire où son épaisseur est de l'ordre de D/V . Cette différence nous conduira, lors de l'additionnement du système, à choisir des échelles différentes de celles utilisées habituellement, basées sur la longueur capillaire chimique introduite au §2.4.1, et à effectuer aussi des simplifications différentes.

On étudie la stabilité du système autour de l'état de base décrit dans le §2.3.2, et puisque l'on va s'intéresser à des échelles spatiales de l'ordre de $\ell_\chi < 1$ mm, beaucoup plus petites que l'échelle diffusive chimique $D/V \sim 100$ m et que l'échelle de diffusion thermique $\kappa/V \sim 10$ km, on pourra supposer les profils de température et de concentration approximativement linéaires au voisinage de l'interface. Le profil de température est alors donné par la température de l'interface et les gradients calculés dans le §2.3.2. Pour le profil de concentration, on supposera que le gradient est proche de sa borne inférieure,

$$G_c = (k - 1)c_0 \frac{V}{D} \quad (2.53)$$

comme discuté au §2.3.2, et que la concentration à l'interface côté liquide, c_i , est proche de c_0 .

On superpose à l'état de base une perturbation infinitésimale, dont on veut étudier l'évolution. On se place dans un repère (x, y, z) où z représente la direction verticale et (x, y) forment un plan horizontal confondu avec l'interface non perturbée. L'interface à

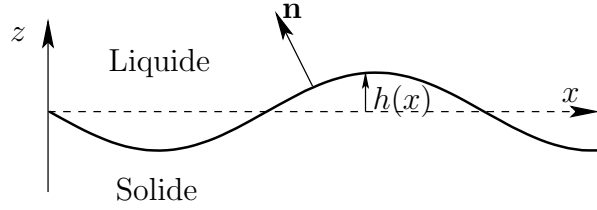


Figure 2.6 – Front de solidification séparant le solide nouvellement formé (en bas) du liquide (en haut).

alors une topographie $h(x, y)$ infinitésimale (figure 2.6), la vitesse de cristallisation en (x, y) étant égale à $V + \partial h / \partial t$ où V est la vitesse moyenne d'avancée de l'interface. Les champs de température et de concentration sont modifiés en réponse à cette topographie.

L'évolution du système obéit au jeu d'équations suivant :

(i) À l'interface, la conservation de l'énergie donne la condition de Stefan

$$(\rho_s L - \gamma \mathcal{K}) \left(V + \frac{\partial h}{\partial t} \right) = (k^s \nabla T|_s - k^\ell \nabla T|_\ell) \cdot \mathbf{n} \quad (2.54a)$$

où les gradients de température sont pris en $h(x, y)$, et la conservation du soluté s'écrit

$$(k - 1)c \left(V + \frac{\partial h}{\partial t} \right) = D \nabla c|^\ell \cdot \mathbf{n}. \quad (2.54b)$$

À ces conditions, s'ajoute la condition de Gibbs-Thomson qui donne la température à l'interface

$$T^s = T_0^s + m_c(c - c_i) - m_p \rho^\ell h + \Gamma \nabla^2 h. \quad (2.54c)$$

(ii) Dans le solide et le liquide, la température et la concentration obéissent à des équations de diffusion

$$\frac{\partial T}{\partial t} - V \frac{\partial T}{\partial z} = \kappa^s \nabla^2 T + H^s, \quad (2.54d)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} - V \frac{\partial T}{\partial z} = \kappa^\ell \nabla^2 T + H^\ell, \quad (2.54e)$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} - V \frac{\partial c}{\partial z} = D \nabla^2 c. \quad (2.54f)$$

2.4.3 Adimensionnement

On adimensionne le système d'équation en choisissant la longueur capillaire chimique ℓ_χ comme échelle spatiale et ℓ_χ^2/D comme échelle temporelle. On introduit la température adimensionnelle

$$\Theta = \frac{T - T_s(p, c_0)}{\Delta T} = \frac{T - T_{\text{icb}} - m_p G_P z}{\Delta T}, \quad \Delta T = \bar{G}_T \ell_\chi \quad (2.55)$$

où \bar{G}_T est le gradient thermique moyen, pondéré par les conductivité thermiques, à l'ICB auquel on a soustrait le gradient de température de solidification,

$$\bar{G}_T = \frac{k^s G_T^s + k^\ell G_T^\ell}{k^s + k^\ell} - m_P G_P = \frac{\lambda G_T^s + G_T^\ell}{\lambda + 1} - m_P G_P. \quad (2.56)$$

La concentration est mise à l'échelle en introduisant

$$\chi = \frac{c - c_i}{\Delta c}, \quad \Delta c = G_c \ell_\chi, \quad (2.57)$$

avec $G_c = c_i(k - 1)V/D$, c_i étant la concentration à l'interface, et est de l'ordre de c_0 . Avec cette définition, $\bar{\chi} = 0$ à l'interface.

(i) Au niveau de l'interface, la conservation de la chaleur s'écrit

$$-\mathcal{L}(1 + \tilde{\gamma} \nabla^2 h) \left(1 + p_\chi^{-1} \frac{\partial h}{\partial t} \right) = (\lambda \nabla \Theta|_{h-} - \nabla \Theta|_{h+}) \cdot \mathbf{n} + M_p(\lambda - 1) \quad (2.58a)$$

où $\mathcal{L} = G_T^L/\bar{G}_T$ est un paramètre d'ordre 1 quantifiant l'importance de la chaleur latente sur le gradient thermique à l'interface, et

$$\tilde{\gamma} = \frac{\gamma/\ell_\chi}{\rho_s L}$$

compare la chaleur absorbée par la création d'interface, pour un rayon de courbure égal à la longueur capillaire chimique, à la chaleur latente libérée par cristallisation. La conservation du soluté à l'interface s'écrit

$$[1 - p_\chi(1 - k)\chi] \left(1 + p_\chi^{-1} \frac{\partial h}{\partial t} \right) = \nabla \chi|_{h+} \cdot \mathbf{n}. \quad (2.58b)$$

et la condition de Gibbs-Thomson s'écrit

$$\Theta = -M_c(\chi + \nabla^2 h) \quad (2.58c)$$

où

$$M_c \equiv -\frac{m_c G_c}{\bar{G}_T}$$

compare le gradient de température de solidification induit par le gradient de concentration à \bar{G}_T .

(ii) Si l'on ignore l'enrichissement séculaire du noyau en éléments légers, négligeable à l'échelle de temps considérée, l'équation de diffusion du soluté dans le liquide s'écrit

$$\frac{\partial \chi}{\partial t} - p_\chi \frac{\partial \chi}{\partial z} = \nabla^2 \chi \quad (2.58d)$$

où on a introduit le nombre de Péclet chimique $p_\chi = \ell_\chi V/D$.

Les équations de diffusion de la chaleur dans le solide et le liquide s'écrivent

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t} - p_\chi \frac{\partial \Theta}{\partial z} = Le^\ell \nabla^2 \Theta + \mathcal{H}_p + \mathcal{H}^\ell \quad (2.58e)$$

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t} - p_\chi \frac{\partial \Theta}{\partial z} = Le^s \nabla^2 \Theta + \mathcal{H}_p + \mathcal{H}^s \quad (2.58f)$$

où $Le^{\ell,s} = \kappa^{\ell,s}/D$ est le nombre de Lewis dans la phase liquide (indice $^\ell$) ou la phase solide (indice s), et

$$\mathcal{H}^{\ell,s} = \frac{\left(\rho^{\ell,s} h^{\ell,s} + \Phi^{\ell,s} - \rho^{\ell,s} c_p^{\ell,s} \dot{T}_{\text{icb}} \right) \ell_\chi}{\rho^s L V}$$

compare la production volumique de chaleur dans une couche d'épaisseur ℓ_χ à la chaleur latente libérée par la cristallisation. \mathcal{H}_p est un terme puits qui apparaît car l'on a soustrait le profil de température de solidification au profil de température,

$$\mathcal{H}_p = \frac{\ell_\chi}{D\bar{G}_T} \left(\kappa \nabla^2 T_s + V \frac{\partial T_s}{\partial z} \right) = -p_\chi M_p \left(1 + \frac{\kappa/V}{r_{ic}(t)} \right)$$

où

$$M_p = \frac{m_p G_p}{\bar{G}_T}.$$

Tous les paramètres adimensionnels, \mathcal{L} , M_p , M_c et $\tilde{\gamma}$, ont été définis de manière à être positifs.

Dans les équations de diffusion de la chaleur dans le solide et le liquide, le nombre de Péclet est petit, $p_\chi \sim 10^{-5}$, le nombre de Lewis est grand, $Le \sim 5 \times 10^3$, et les nombres $\mathcal{H}^{\ell,s} \sim 10^{-9}$ et $\mathcal{H}_p \sim -10^{-5}$ sont petits. Θ peut alors être supposée harmonique, $\nabla^2 \Theta = 0$, et le profil de Θ peut être supposé linéaire dans l'état de base. Le profil de χ peut lui aussi être supposé linéaire puisque p_χ est grand (l'échelle spatiale considérée est petite devant la longueur de diffusion D/V). L'état de base peut alors être écrit sous la forme

$$\bar{\Theta} = \mathcal{G}_\Theta^\ell z \quad \text{pour } z > 0 \quad (2.59a)$$

$$\bar{\Theta} = \mathcal{G}_\Theta^s z \quad \text{pour } z < 0 \quad (2.59b)$$

$$\bar{\chi} = z \quad (2.59c)$$

où

$$\mathcal{G}_\Theta^s = (\Lambda - 1)M_p, \quad \text{et} \quad \mathcal{G}_\Theta^\ell = (\lambda\Lambda - 1)M_p + \mathcal{L}. \quad (2.60)$$

2.4.4 Instabilité linéaire

On introduit une perturbation infinitésimale de la topographie h de l'interface (figure 2.6) à laquelle sont associées une perturbation Θ' du champ de température et une perturbation χ' du champ de concentration :

$$\begin{cases} h = h' \\ \chi = \bar{\chi} + \chi' \\ \Theta = \bar{\Theta} + \Theta' \end{cases}.$$

Si l'on substitue ces expressions dans le système (2.58), en négligeant les termes d'ordre supérieur en h , on obtient un système linéarisé décrivant l'évolution des perturbations :

$$\frac{\partial \Theta'}{\partial t} - p_\chi \frac{\partial \Theta'}{\partial z} = Le^\ell \nabla^2 \Theta' \quad (2.61a)$$

$$\frac{\partial \Theta'}{\partial t} - p_\chi \frac{\partial \Theta'}{\partial z} = Le^s \nabla^2 \Theta' \quad (2.61b)$$

$$\frac{\partial \chi'}{\partial t} - p_\chi \frac{\partial \chi'}{\partial z} = \nabla^2 \chi' \quad (2.61c)$$

$$\mathcal{L} \left(p_\chi^{-1} \frac{\partial h}{\partial t} + \tilde{\gamma} \nabla^2 h \right) = - \left(\lambda \frac{\partial \Theta'}{\partial z} \Big|_{h-} - \frac{\partial \Theta'}{\partial z} \Big|_{h+} \right) \quad (2.61d)$$

$$\left(p_\chi^{-1} \frac{\partial}{\partial t} - p_\chi(1-k) \right) h - \left(\frac{\partial}{\partial z} + p_\chi(1-k) \right) \chi' = 0 \quad (2.61e)$$

$$\left[\mathcal{G}_\Theta^\ell + M_c(1 + \nabla^2) \right] h + \Theta'^\ell + M_c \chi' = 0 \quad (2.61f)$$

Le système étant linéaire, on peut en chercher des solutions harmoniques, de la forme

$$\begin{pmatrix} h \\ \chi' \\ \Theta'^\ell \\ \Theta'^s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h_1 \\ \chi_1(z) \\ \Theta_1^\ell(z) \\ \Theta_1^s(z) \end{pmatrix} \exp(\sigma t + i k_x x + i k_y y) \quad (2.62)$$

que l'on insère dans le système (2.61) pour obtenir

$$\sigma \Theta_1^\ell - p_\chi \frac{d\Theta_1^\ell}{dz} = L e^\ell \left(\frac{d^2 \Theta_1^\ell}{dz^2} - \bar{k}^2 \Theta_1^\ell \right) \quad (2.63a)$$

$$\sigma \Theta_1^s - p_\chi \frac{d\Theta_1^s}{dz} = L e^s \left(\frac{d^2 \Theta_1^s}{dz^2} - \bar{k}^2 \Theta_1^s \right) \quad (2.63b)$$

$$\sigma \chi_1^s - p_\chi \frac{d\chi_1^s}{dz} = \left(\frac{d^2 \chi_1^s}{dz^2} - \bar{k} \chi_1^s \right) \quad (2.63c)$$

où $\bar{k}^2 = k_x^2 + k_y^2$. Les solutions sont de la forme $\tilde{\Theta}^\ell \exp(\beta^\ell z)$, $\tilde{\Theta}^s \exp(\beta^s z)$ et $\tilde{\chi} \exp(\beta_\chi z)$, où

$$\begin{aligned} \beta^\ell &= -\frac{1}{2Le^\ell} \left[p_\chi + \sqrt{p_\chi^2 + 4Le^\ell(\bar{k}^2 Le^\ell + \sigma)} \right], \\ \beta^s &= -\frac{1}{2Le^s} \left[p_\chi - \sqrt{p_\chi^2 + 4Le^s(\bar{k}^2 Le^s + \sigma)} \right], \\ \beta_\chi &= -\frac{1}{2} \left[p_\chi + \sqrt{p_\chi^2 + 4(\bar{k}^2 + \sigma)} \right]. \end{aligned}$$

En utilisant les formes harmoniques des perturbations, les expressions trouvées pour Θ_1^ℓ et Θ_1^s , et la continuité de la température au niveau de l'interface, $\bar{\Theta}^s(h) + \Theta_1^s(h) = \bar{\Theta}^\ell(h) + \Theta_1^\ell(h)$, on obtient un système en h_1 , χ_1 et Θ_1 ,

$$\left[\mathcal{L} (p_\chi^{-1} \sigma - \tilde{\gamma} \bar{k}^2) + \lambda \beta^s (\mathcal{G}_\Theta^\ell - \mathcal{G}_\Theta^s) \right] h_1 + (\lambda \beta^s - \beta^\ell) \Theta_1^\ell = 0 \quad (2.63d)$$

$$(p_\chi^{-1} \sigma - p_\chi(1-k)) h_1 - (p_\chi(1-k) + \beta_\chi) \chi_1(h) = 0 \quad (2.63e)$$

$$\left[\mathcal{G}_\Theta^\ell + M_c(1 - \bar{k}^2) \right] h_1 + \Theta_1^\ell + M_c \chi_1 = 0 \quad (2.63f)$$

Ce système admet des solutions non triviales si le déterminant de la matrice des coefficients est nul. De cette condition, découle la relation de dispersion décrivant la stabilité du système :

$$\sigma = p_\chi \left\{ \frac{\beta_\chi}{p_\chi(1-k) + \beta_\chi} M_c + \frac{\lambda \beta^s \mathcal{G}_\Theta^s - \beta^\ell \mathcal{G}_\Theta^\ell}{\lambda \beta^s - \beta^\ell} - f_\gamma(\bar{k}) \right\} \Bigg/ \left\{ \frac{\mathcal{L}}{\lambda \beta^s - \beta^\ell} - \frac{M_c}{p_\chi(1-k) + \beta_\chi} \right\}$$

$$(2.64)$$

où

$$f_\gamma(\bar{k}) = \left(M_c - \frac{\mathcal{L}\tilde{\gamma}}{\lambda\beta^s - \beta^\ell} \right) \bar{k}^2.$$

Puisque $\lambda\beta^s - \beta^\ell > 0$ et $p_\chi(1-k) + \beta_\chi < 0$, le dénominateur est toujours positif, et le signe du taux de croissance est donc donné par le signe du numérateur. Celui-ci est composé de trois termes. Le premier correspond à au gradient compositionnel, et est toujours positif et déstabilisant. Le second correspond au gradient de sur-saturation et peut être positif (déstabilisant) comme négatif (stabilisant) suivant la vitesse de cristallisation. Le dernier terme correspond à la stabilisation de l'interface par l'effet de Gibbs-Thomson qui est toujours stabilisant.

On peut obtenir une relation de dispersion simplifiée en tenant compte du fait que $p_\chi \ll 1$, et en supposant que la longueur d'onde critique doit être de l'ordre de la longueur capillaire, comme suggérée au §2.4.1. Dans ce cas, on montre que $\beta_\chi \sim -\bar{k}$, $\beta^\ell \sim -\bar{k}$ et $\beta^s \sim \bar{k}$: la distance de décroissance des perturbations est de l'ordre de la longueur d'onde. On obtient alors la forme suivante de la relation de dispersion :

$$\frac{\sigma}{\bar{k}} = p_\chi \left\{ M_c + 1 - f_\gamma(\bar{k}) \right\} / \left\{ \frac{\mathcal{L}}{\lambda + 1} + M_c \right\}. \quad (2.65)$$

avec

$$f_\gamma(\bar{k}) \simeq M_c \bar{k}^2 - \frac{\mathcal{L}\tilde{\gamma}}{\lambda + 1} \bar{k}, \quad (2.66)$$

et la stabilité marginale est décrite par

$$M_c + 1 - f_\gamma(\bar{k}) = 0. \quad (2.67)$$

On peut en déduire un critère approché d'instabilité, qui s'énonce simplement

$$M_c + 1 > 0 \quad \Leftrightarrow \quad \text{instable}. \quad (2.68)$$

Si l'on revient en variables dimensionnées, le critère d'instabilité s'écrit

$$m_c G_c + \frac{k^s G_T^s + k^\ell G_T^\ell}{k^s + k^\ell} - m_P G_P > 0. \quad (2.69)$$

Le critère obtenu diffère de la condition de surfusion (même si, quantitativement, la différence est petite), pour ce qui est du traitement du champ de température. Le critère de surfusion ignore le rôle du champ de température dans la phase solide, qui joue pourtant sur l'évolution de perturbations thermiques de manière similaire au champ dans la phase liquide. En particulier, le système peut en théorie être instable thermiquement sans surfusion si la conductivité thermique est plus grande dans le solide que dans le liquide ($\lambda > 1$). C'est le cas pour la plupart des métaux, et sans doute pour le fer dans les conditions de la graine ; les valeurs proposées par Stacey (1992) par exemple donnent $\lambda = k^s/k^\ell \sim 1.35$.

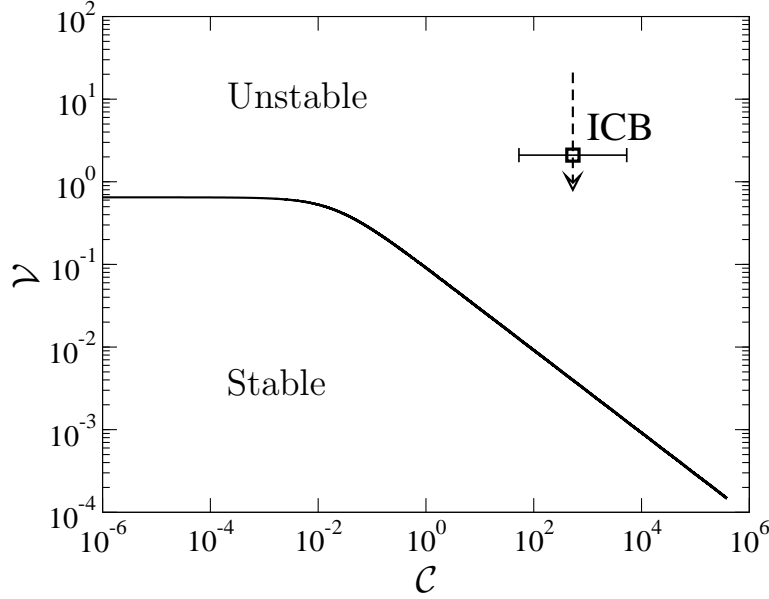


Figure 2.7 – Diagramme de stabilité morphologique dans un espace $(\mathcal{C}, \mathcal{V})$, pour la graine au cours de sa croissance, en supposant un âge de 1 Ga. Le symbole carré gris indique la position actuelle de la graine, et la flèche sa position passée et la direction de son évolution. La barre d'erreur en \mathcal{C} est essentiellement due à la barre d'erreur sur m_c .

2.5 Résultats et discussion

On peut maintenant utiliser la relation de dispersion pour construire un diagramme de stabilité morphologique pour la graine. Les deux paramètres dimensionnels les plus importants sont la vitesse de cristallisation, V , et le produit $m_c c_i$. Ces deux paramètres étant présents simultanément dans la plupart des paramètres adimensionnels, il est pratique de redéfinir un nouveau jeu de nombres sans dimension qui isolent ces deux paramètres. On définit ainsi

$$\mathcal{C} = \frac{\bar{G}_T}{G_T^L} M_c = \mathcal{L}^{-1} M_c = \frac{(1-k)k^\ell}{\rho^s L D} |m_c| c_i, \quad (2.70)$$

qui dépend de $m_c c_i$ mais pas de V et

$$\mathcal{V} = \sqrt{\mathcal{L} M_P^{-1}} = \sqrt{\frac{G_T^L}{m_p G_p}} \propto V \quad (2.71)$$

qui est proportionnel à V si $r_{ic}(t) \propto \sqrt{t}$. Tel que défini, \mathcal{V} compare l'effet déstabilisant du gradient de température, qui est de l'ordre de G_T^L , à l'effet stabilisant du gradient de pression.

Au cours de l'histoire de la graine, le taux de cristallisation évolue, ainsi que les gradients de température, de pression et de composition. Pour un jeu de paramètres thermophysiques donné, un nombre \mathcal{C} fixé, et un âge supposé de la graine, l'état de base ne dépend que du rayon de la graine. En se donnant une histoire thermique du noyau - on supposera ici que $r_{ic}(t) \propto \sqrt{t}$ - l'état de base peut être calculé à partir de la vitesse de cristallisation $V(t)$, ou, de manière équivalente, à partir du paramètre \mathcal{V} .

On peut donc prendre en compte la dépendance en \mathcal{V} de l'état de base dans l'équation de dispersion et construire un diagramme de stabilité dans l'espace $(\mathcal{C}, \mathcal{V})$ dans lequel les conditions thermo-chimiques à l'ICB évoluent au cours de la croissance de la graine. La figure 2.7 présente un tel diagramme calculé pour un âge supposé de la graine de 1.5 Ga. La courbe noire représente la limite de stabilité marginale et sépare le domaine instable (\mathcal{C} et \mathcal{V} grands) du domaine stable (\mathcal{C} et \mathcal{V} petits). La position actuelle de l'ICB est indiquée par le symbole carré, avec une barre d'erreur en \mathcal{C} correspondant essentiellement à l'incertitude sur m_c . La flèche tiretée indique la position passée de l'ICB et la direction de son évolution. L'évolution de \mathcal{C} induite par l'évolution chimique du noyau est minime en comparaison de son incertitude. Le changement de pente de la courbe de stabilité marginale est du à l'effet du gradient de sursaturation, qui est stabilisant pour des valeurs faibles de \mathcal{V} (pas de surfusion thermique), et déstabilisant pour des valeurs de \mathcal{V} supérieures à ~ 1 (surfusion thermique).

La graine est nettement dans le domaine instable, et cette conclusion n'est pas affectée par un changement (raisonnable) du jeu de paramètres thermophysiques. L'âge de la graine change la distance à la courbe de stabilité marginale - la graine est d'autant plus instable que son âge est petit - mais l'effet pour $0.5 < \tau_{ic} < 3$ Ga est plus faible que l'effet de l'incertitude sur \mathcal{C} .

p_χ	$\sim 10^{-6} - 10^{-5}$	$m_c G_c$	$10^{\pm 1} \text{ K.m}^{-1}$
M_c	$\sim 5 \times 10^{3 \pm 1}$	$m_p G_p$	$-5 \times 10^{-4} \text{ K.m}^{-1}$
M_p	~ 5	G_T^L	$-10^{-3} \text{ K.m}^{-1}$
\mathcal{L}	~ 5	G_T^s	$-3 \times 10^{-4} \text{ K.m}^{-1}$
Le	$\sim 5 \times 10^3$	G_T^ℓ	$-10^{-3} \text{ K.m}^{-1}$
$\tilde{\gamma}$	$\sim 10^{-7}$	ℓ_θ	1 cm
λ	~ 1.3	ℓ_χ	0.1 – 1 mm
\mathcal{C}	$\sim 10^{3 \pm 1}$		
\mathcal{V}	~ 2		

Table 2.2 – Valeurs typiques actuelles des paramètres adimensionnels et dimensionnels de la graine.

On peut aller un peu plus loin en estimant le taux de croissance de l'instabilité et la longueur d'onde pour laquelle le taux de croissance est maximal. Cela peut être fait en résolvant numériquement l'équation de dispersion, mais il est aussi possible d'en trouver une bonne approximation analytique. Dans le cas de la graine, l'effet du gradient compositionnel domine l'instabilité et $M_c \gg 1$. Dans ce cas, la relation de dispersion à petit nombre de Péclet peut se simplifier une fois de plus de manière significative pour donner simplement

$$\sigma = p_\chi (1 - \bar{k}^2) \bar{k}. \quad (2.72)$$

La figure 2.8 montre le taux de croissance en fonction de la longueur d'onde pour les paramètres de la graine, donnés dans le tableau 2.2, calculé avec la relation de dispersion complète et la relation simplifiée, les deux courbes se superposant parfaitement. D'après la relation (2.72), le nombre d'onde critique est $k_c = 1$, ce qui correspond à une longueur d'onde critique dimensionnelle $\lambda_c = 2\pi\ell_\chi$. Le taux de croissance est maximal pour un

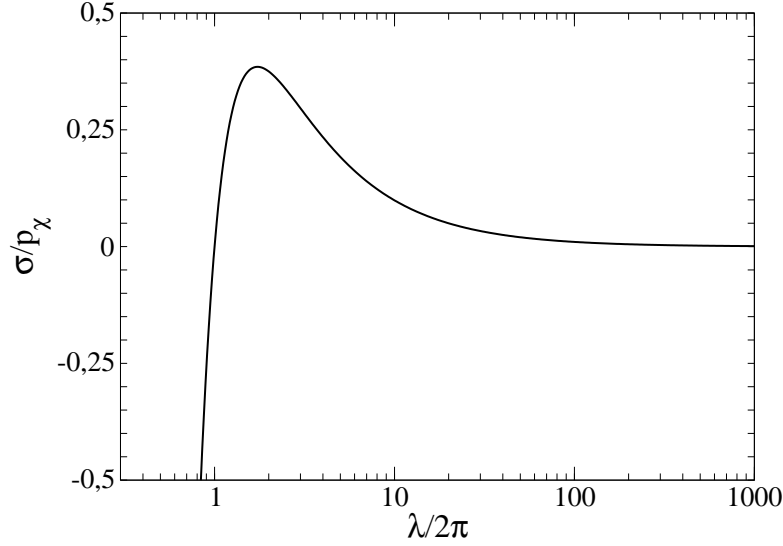


Figure 2.8 – Taux de croissance adimensionnel, normalisé par le nombre de Péclet chimique p_χ en fonction de la longueur d’onde de la perturbation. Le calcul a été effectué avec les paramètres de la table 2.2, pour lesquels la relation de dispersion simplifiée (équation (2.72)) donne une courbe identique à celle calculée à partir de la relation de dispersion complète.

nombre d’onde égal à $1/\sqrt{3}$ et vaut

$$\sigma_{\max} = \frac{2}{3\sqrt{3}} p_\chi. \quad (2.73)$$

En dimensionné, le taux de croissance maximal est

$$\tilde{\sigma}_{\max} = \frac{2}{3\sqrt{3}} \frac{V}{\ell_\chi} \quad (2.74)$$

et on peut définir un temps typique de l’instabilité morphologique, τ_m , qui est de l’ordre de

$$\tau_m = \frac{1}{\tilde{\sigma}_{\max}} \sim \left(\frac{10^3 \text{ K}}{|m_c|} \right)^{1/2} \left(\frac{10^{-11} \text{ m.s}^{-1}}{V} \right)^{3/2} \times 3 \text{ ans.} \quad (2.75)$$

Ce temps est très court devant l’âge de la graine, et on pourrait en conclure que l’instabilité a nécessairement dû se développer à la surface de la graine et former par conséquent une zone dendritique (Shimizu *et al.*, 2005; Deguen *et al.*, 2007).

Cette conclusion est à modérer par le fait que ce temps est en revanche long comparé à des temps convectifs typiques dans le noyau, et en particulier à la période de pulsation de la couche limite chimique, que l’on avait estimée être de l’ordre de quelques heures (§2.3.2). Le mécanisme de l’instabilité, tel qu’explicité au §2.4.1, nécessite une cohérence spatiale entre la perturbation des champs de T et c et celle de l’interface : les champs de T et c doivent rester en phase avec la topographie de l’interface. Le développement de l’instabilité semble plus difficile si la couche limite directement adjacente au front de solidification est mélangée avant un développement significatif de la perturbation

de l'interface. Puisque le temps de croissance de l'instabilité est près de trois à quatre ordres de grandeur plus grand que la période de pulsation de la couche limite compositionnelle, la question mérite d'être discutée. L'effet de la convection ambiante, ou de la déstabilisation périodique de l'interface, peut probablement être faible si la longueur d'onde critique de l'instabilité morphologique, qui détermine l'épaisseur de la zone perturbée par l'interface, est très petite devant l'épaisseur de la couche limite. Pour la graine, la longueur d'onde critique est de l'ordre de $\lambda_c \sim 0.5 - 5$ mm, alors que l'on a estimé l'épaisseur critique de la couche limite compositionnelle à $\delta_c \sim 5$ mm (voir §2.3.2). La différence n'est pas énorme et on peut s'attendre à ce que la déstabilisation de la couche limite affecte de manière considérable la proximité immédiate de l'interface (*i.e.* à une distance de l'ordre de λ_c).

La figure 2.9 compare λ_c à δ_c , et le temps de croissance de l'instabilité τ_m à la période de pulsation de la couche limite τ_c , en fonction de la vitesse de cristallisation V . On a fait apparaître sur les deux graphes les domaines de vitesse de cristallisation de la graine et des expériences typiques de laboratoire. En laboratoire, la longueur d'onde critique est petite devant l'épaisseur de la couche limite, et la période de pulsation est plus grande (ou au moins du même ordre de grandeur) que le temps de déstabilisation morphologique, ce qui laisse penser que la convection n'affecte que relativement peu l'instabilité morphologique (Worster, 2002). Dans la graine, la longueur d'onde critique est du même ordre de grandeur que l'épaisseur de la couche limite compositionnelle, et le temps de déstabilisation morphologique est beaucoup plus grand que le temps de pulsation de la couche limite, ce qui suggère que la convection et le mélange de la couche limite doit affecter l'instabilité morphologique.

Depuis les travaux de Loper & Roberts (1981), Fearn *et al.* (1981) et Loper (1983), qui ont montré que la proximité de l'ICB devait être en état de surfusion si la solidification est plane, la présence d'une zone de mush a été largement acceptée par la communauté géodynamique. Ceci est justifié en partie par le fait qu'il est très difficile en laboratoire de stabiliser un front de solidification instable en comptant sur la convection naturelle ou en imposant un écoulement (*e.g.* Davis, 2001). En discutant de la présence d'une zone dendritique à l'ICB, Shimizu *et al.* (2005) citent Buffett *et al.* (2001), qui font remarquer que "transferring results from one physical setting to another without proper analysis can lead to misconceptions". Buffett *et al.* (2001) font référence au travail de Morse (1986, 2001), récemment revu et augmenté (Morse, 2002), qui se base sur une extrapolation à la graine d'observations effectuées sur une chambre magmatique fossile. L'argument principal de Morse (1986, 2002), parfaitement recevable qualitativement, est que la convection dans le noyau doit évacuer efficacement l'excès d'éléments légers à l'ICB et faire tendre la porosité d'une éventuelle zone de mush vers zéro. La cristallisation de chambres magmatiques et celle de la graine diffèrent par bien des aspects et ces extrapolations sont à considérer avec prudence. Mais la mise en garde de Buffett *et al.* (2001), utilisée à l'origine comme argument supportant la présence de zones de mush dans le noyau, est aussi applicable à l'extension de l'analyse de stabilité linéaire, pourtant bien vérifiée en laboratoire, à la cristallisation de la graine. Le problème en cause ici est la très grande différence d'échelles spatiales et temporelles entre les expériences de laboratoire et la graine. L'analyse très simple proposée ci-dessus suggère que l'effet de la convection et du mélange à proximité du front de solidification doit avoir un impact beaucoup plus fort dans les conditions de la graine que dans celles rencontrées en laboratoire.

Qualitativement au moins, il semble difficile de permettre le développement de l'in-

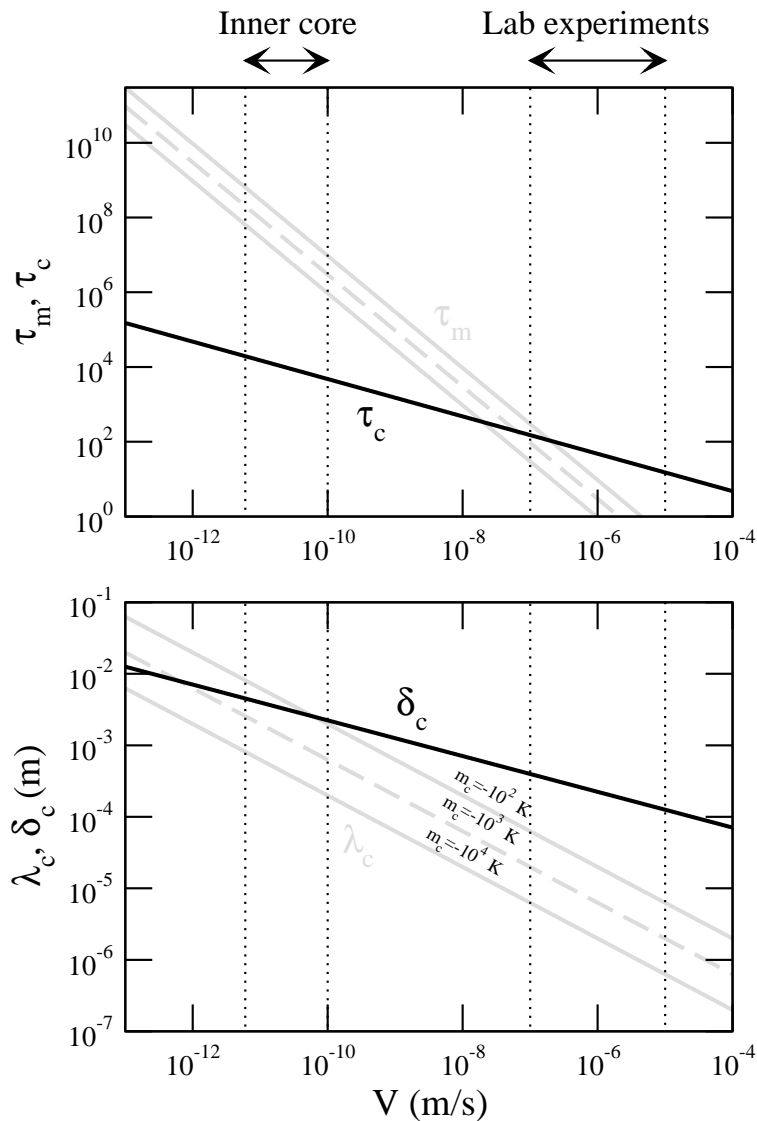


Figure 2.9 – En haut : temps de croissance de l’instabilité morphologique, τ_m comparé à la période de pulsation de la couche limite compositionnelle, τ_c , en fonction de la vitesse de cristallisation. **En bas :** longueur d’onde critique λ_c de l’instabilité morphologique, comparée à l’épaisseur critique de la couche limite compositionnelle δ_c . τ_m et λ_c sont tracés pour trois valeurs différentes de m_c . (Note : les paramètres thermophysiques de la graine (viscosité, diffusivité, gravité, diagramme de phase, ...) sont bien sûr différents des paramètres expérimentaux, mais restent du même ordre de grandeur. Les courbes ont été calculées avec les paramètres de la graine et ne sont valables qu’à un facteur près pour le domaine de V des expériences. Pour ce qui est de la pente du liquidus, m_c est typiquement de l’ordre de -10^2 (solutions aqueuses) à -10^3 (métaux) en laboratoire.)

stabilité morphologique si la proximité immédiate de l'interface est régulièrement perturbée et mélangée, à une fréquence à ce point grande comparée au taux de croissance de l'instabilité. Même s'il est pour l'instant difficile de conclure de manière certaine, cette très grande différence d'échelle de temps, couplée au fait que la longueur d'onde morphologique critique est sensiblement du même ordre que l'épaisseur de la couche limite, est à mon avis un point important quant au régime de cristallisation de la graine. Au minimum ce point remet en cause la validité de l'analyse de stabilité. Une piste possible pour améliorer cette analyse serait d'étudier la stabilité de l'interface en présence d'un bruit important dans les champs de température et de composition.

Si l'interface est effectivement stabilisée, le voisinage de l'interface reste alors surfondue et on peut envisager la croissance de cristaux en volume dans le liquide suivie de leur sédimentation. Shimizu *et al.* (2005) ont étudié la possibilité de cristallisation en volume à partir de germes dans une couche surfondue dont l'épaisseur a été prise égale à l'épaisseur de la couche limite compositionnelle stationnaire, $D/V \sim 100$ m et ont conclu que la contribution de la cristallisation en volume au taux de cristallisation total est très probablement faible, en raison de la difficulté d'apporter de nouveaux germes de cristallisation. Leur conclusion est encore renforcée si l'épaisseur de la couche surfondue est significativement plus faible que les 100 m de la couche diffusive proposée par Shimizu *et al.* (2005). L'essentiel de la cristallisation se ferait alors directement sur l'interface.

La déstabilisation de l'interface a pu être plus facile au début de la croissance de la graine, où la vitesse de cristallisation était plus grande et la gravité plus faible. Le taux de croissance de l'instabilité étant à peu de choses près proportionnel à la vitesse de cristallisation, l'instabilité morphologique peut aussi être facilitée si la graine cristallise localement à un taux significativement plus grand que le taux de cristallisation moyen.

2.6 Un modèle de formation d'une couche dense à la base du noyau ?

Dans l'introduction, a été mentionné l'existence d'arguments sismologiques en faveur de la présence d'une couche anormale à la base du noyau, découverte par Souriau & Poupinet (1991) et supportée par plusieurs études ultérieures (Kennett *et al.*, 1995; Souriau & Roudil, 1995; Song & Helmberger, 1995b). Ces observations semblent suggérer la présence d'une couche dense, et donc stratifiée de manière stable dans les ~ 150 km au dessus de l'ICB. La présence d'une telle couche est très difficilement conciliable avec notre vision de la convection dans le noyau, où la cristallisation de la graine induite par le refroidissement du noyau s'accompagne du rejet d'éléments légers et de chaleur latente à l'ICB et participent à maintenir la convection et la dynamo. Dans ce modèle, une très fine couche superadiabatique et comparativement riche en éléments légers doit être présente à la base du noyau. En terme de vitesse sismique, l'effet de cette couche serait opposé à ce qu'observent Souriau & Poupinet (1991), et la couche limite est de toute façon bien trop fine pour être observée par la sismologie. Peut être pour cette raison, la possible existence de cette couche a été largement ignorée par la communauté géodynamique avant le récent article de Gubbins *et al.* (2008). Pourtant si l'observation de cette couche se confirme, il devient nécessaire d'expliquer son origine d'une manière ou d'une autre.

2.6.1 La cristallisation de la graine selon Gubbins *et al.* (2008)

Gubbins *et al.* (2008) ont construit une famille de modèles de structure thermo-chimique de la base du noyau compatibles avec les observations sismologiques. Gubbins *et al.* (2008) discutent en premier lieu la possible nature physique de cette couche et montrent que la seule manière viable d'expliquer les données sismologiques est de supposer l'existence d'une stratification chimique stable à la base du noyau.

Gubbins *et al.* (2008) envisagent un processus similaire à celui proposé par Braginsky (1963) pour expliquer l'origine de la couche F présente dans les modèles sismologiques de l'époque. Braginsky (1963) considère la cristallisation d'un noyau riche en silicium dont la concentration en Si serait supérieure à la concentration eutectique. Le solide cristallisé est alors un composé riche en silicium, disons FeSi, et le liquide résiduel est appauvri en Si. Le composé FeSi est plus léger que le fer liquide et flotte donc vers la surface du noyau. L'adiabat étant supposé moins pentu que le gradient de température de fusion, ce solide léger se retrouve dans un environnement sous-saturé et fond à nouveau, enrichissant en Si les couches supérieures. Ce processus s'accompagne donc d'un transfert de Si de la base du noyau vers le haut et résulte en une couche stratifiée de manière stable, riche en fer à sa base et plus riche en Si à mesure que l'on s'écarte de l'ICB. La base de cette couche finit par être suffisamment riche en fer pour que du fer solide précipite et forme la graine. En pratique ce modèle rencontre des problèmes considérables. En particulier, la couche ainsi formée présente un gradient de température très faible et, les transferts advectifs de chaleur étant prohibés par la stratification, ne permet pas un transfert de chaleur suffisant pour expliquer la solidification de la graine jusqu'à sa taille actuelle (Fearn & Loper, 1983; Gubbins *et al.*, 2008). Gubbins *et al.* (2008) proposent un mécanisme similaire dans le cas d'un noyau riche en fer, où des cristaux se formeraient en volume, couleraient vers la graine et fondraient avant d'atteindre l'ICB. Si l'on comprend bien pourquoi un cristal de FeSi puisse fondre en s'élevant vers la surface, il est plus difficile d'expliquer comment un cristal de fer puisse fondre en chutant vers la graine, et Gubbins *et al.* (2008) ne s'appesantissent pas sur ce problème. Si un cristal de fer chute de manière adiabatique, il aurait au contraire tendance à se solidifier davantage, l'adiabat étant moins pentu que le profil de température de solidification.

2.6.2 Fusion locale et formation d'une couche dense riche en fer

Une autre manière d'expliquer la présence d'une couche dense à la base du noyau est de supposer la présence de fusion à l'ICB. Même si l'ICB est généralement vue comme un front de solidification, c'est avant tout une interface de changement de phase, sans doute très proche de l'équilibre thermodynamique, et qui peut *a priori* évoluer dans un sens ou dans l'autre. La graine cristallise en moyenne, mais il n'est pas exclu qu'à des échelles de temps ou d'espace plus petites la graine fonde localement. Qualitativement, cette hypothèse est supportée par le fait que l'échelle de temps typique de l'évolution thermique du noyau est beaucoup plus grande que les temps typiques de la dynamique du noyau. Si c'est effectivement le cas, et même si le taux moyen de cristallisation est identique, le résultat pour la dynamique du noyau pourrait être très différent de ce qu'implique le modèle classique où la graine cristallise de manière constante. La fusion locale de la graine formerait un liquide très riche en fer, plus dense que le noyau liquide. Un tel liquide resterait à la base du noyau, et s'étendrait à la surface de la graine par écoulement gravitaire, de telle sorte qu'une couche dense et riche en fer se développerait au cours de la croissance de la graine. Deux questions majeures se posent

alors : (i) comment fondre la graine ? (ii) en supposant un apport de liquide dense par la fusion locale de la graine, sous quelles conditions une couche stable compatible avec les observations sismologiques peut-elle se développer ?

Il est possible que la graine fonde localement en réponse à sa dynamique interne. Karato (1999), dans son modèle de déformation de la graine induite par le champ magnétique toroïdal, obtient un écoulement intense, avec des vitesses dans la graine de l'ordre de 10^{-9} à 10^{-7} m.s $^{-1}$, soit plusieurs ordres de grandeur plus grande que la vitesse de cristallisation de la graine. L'écoulement est poloïdal et implique que la graine cristallise et fonde simultanément dans des régions différentes, à des taux de cristallisation plusieurs ordres de grandeur supérieurs au taux de cristallisation moyen de la graine (Karato, 1999, 2000). Buffett & Bloxham (2000) prédisent aussi la présence locale de fusion, mais à un taux considérablement plus faible, du même ordre que le taux de cristallisation moyen.

Buffett & Bloxham (2000) et Karato (2000) insistent sur le fait que la présence d'un champ magnétique empêche les conditions d'équilibre mécanique et d'équilibre thermique à l'ICB d'être vérifiées simultanément. En l'essence, leur raisonnement est le suivant. La surface de la graine est à l'équilibre thermique (température constante le long de l'ICB) si elle coïncide avec une surface de pression constante, et à l'équilibre mécanique si l'interface est perpendiculaire au champ de gravité. En l'absence de force en volume, ces deux conditions sont vérifiées simultanément : les surfaces isobares sont perpendiculaires à \mathbf{g} . Si l'on suppose cependant, comme le font Buffett & Bloxham (2000) et Karato (2000), que le champ magnétique garde une géométrie à grande échelle à peu près fixe aux échelles de temps qui nous intéressent, la force de Lorentz perturbe le champ de pression moyen et les surfaces isobares ne sont plus perpendiculaires au champ de gravité. L'évolution de l'interface dépend alors essentiellement d'une compétition entre équilibre mécanique et thermique. Si le temps de réponse thermique est petit devant le temps mécanique (un temps d'advection, ou de relaxation, suivant le mécanisme considéré), l'ICB correspond à une surface isotherme et isobare, et le taux de fusion est contrôlé par la vitesse de déformation de la graine. Dans le modèle de Karato (1999), les vitesses radiales dans la graine sont de l'ordre de $10^{-8\pm1}$ m/s et le taux de fusion local est alors plusieurs ordres de grandeur plus grand que le taux de solidification moyen de la graine. Si en revanche le temps de réponse thermique est grand devant le temps mécanique, le taux de fusion est alors limité par la capacité du noyau à transporter la chaleur libérée ou absorbée par le changement de phase.

Buffett & Bloxham (2000) utilisent le terme *équilibre thermodynamique* pour ce que l'on a appelé équilibre thermique, mais ce terme n'est à mon avis pas le plus adapté : le front de solidification peut être à l'équilibre thermodynamique (*i.e.* la température à l'ICB est égale à la température de solidification à la pression et composition locales de l'ICB) et présenter une topographie. La température de l'ICB varie alors latéralement - elle est plus faible au niveau des bosses qu'au niveau des creux - et ces variations latérales de température peuvent nourrir une réponse de l'écoulement dans le noyau qui tend à faire disparaître la topographie. Les variations de température (auxquelles il faut en plus retrancher le gradient adiabatique) sont faibles cependant et la réponse doit être relativement lente. Le taux de cristallisation ou de fusion est donné par la condition de Stefan

$$\rho L \frac{dh}{dt} = \tilde{q} \quad (2.76)$$

où \tilde{q} est l'excès de flux de chaleur à l'ICB par rapport au flux moyen, et h la topographie de l'ICB. Ce flux est dominé par le flux convectif côté noyau, $\tilde{q} \sim \rho c_p \bar{u} \Delta\theta$, où u est la vitesse dans le noyau, $\Delta\theta$ l'écart de température potentielle introduite par la topographie, (\dots) étant la moyenne horizontale. En supposant la température à l'ICB égale en tout point à la température de cristallisation, $\Delta\theta$ est alors donnée par

$$\Delta\theta \sim \left(\frac{dT_s}{dr} - \frac{dT_{ad}}{dr} \right) h \sim (-10^{-4} \text{ K.m}^{-1}) \times h. \quad (2.77)$$

En approximant $\bar{u} \Delta\theta \sim \bar{u} \Delta\theta$, où $\bar{u} \sim 10^{-4} \text{ m.s}^{-1}$ est une vitesse convective typique dans le noyau, on obtient, en utilisant la condition de Stefan, un temps caractéristique

$$\tau \equiv \frac{L}{c_p \rho g (m_P - m_{ad}) \bar{u}} \sim 1000 \text{ ans}. \quad (2.78)$$

Cette estimation est significativement plus grande que celle de Karato (2000) qui a assimilé le temps de réponse thermique à un temps convectif sur l'épaisseur de la couche d'Ekman ($\delta_{Ek} = \sqrt{\nu/\Omega} \sim 1 \text{ m}$), en prenant $\tau = \delta_{Ek}/\bar{u}$ comme temps typique. C'est un temps caractéristique de transport, d'une perturbation de température par exemple, mais qui ne tient pas compte du changement de phase qui est ici le processus limitant. Le temps caractéristique tel que définit ici est probablement plus significatif. Ce temps est plus court, ou du même ordre de grandeur si la graine est très visqueuse, que le temps de relaxation visqueux $\tau_\eta = \eta/(\Delta\rho_{icb} g r_{ic}) \sim 10^{-1\pm4} \text{ an}$, où $\eta = 10^{16\pm4}$ est la viscosité de la graine. Ceci suggère que le maintien d'une topographie à l'ICB se fait suivant un équilibre entre les contraintes responsables du mouvement radial dans la graine (par exemple les contraintes de Maxwell) et les contraintes induites en retour par la topographie. Le taux de fusion est alors limité par l'efficacité de la convection dans le noyau à transporter la chaleur absorbée par le changement de phase. Il semble peu probable que le noyau puisse accommoder un taux de fusion/cristallisation significativement plus grand que le taux moyen de cristallisation de la graine. Il est cependant plausible qu'un taux de fusion local du même ordre que le taux de cristallisation moyen puisse être maintenu.

Une seconde question, si on suppose que la graine puisse effectivement fondre localement, est d'expliquer comme une couche stratifiée d'une épaisseur d'environ 150 km puisse se former et persister. On peut se convaincre assez facilement qu'une telle couche ne peut pas résulter de processus uniquement diffusifs. Une couche chimique diffusive accompagnant l'avancée du front de cristallisation aurait une épaisseur $\sim D/V \sim 100 \text{ m}$. Même en supposant un modèle extrême où cette couche serait primordiale (*i.e.* présente depuis la nucléation de la graine) et se serait étendue au cours de la croissance de la graine, la longueur de diffusion ne serait que $\ell_D \sim \sqrt{D\tau_{ic}} \sim 5 \text{ km}$, ce qui reste loin des 100 à 150 km suggérés par la sismologie. De toute évidence, cette couche n'est pas une couche purement diffusive et nécessite la présence de transport advectif. Alors que le mélange convectif est un problème pour le modèle de Gubbins *et al.* (2008), il est ici nécessaire. Nous envisageons un modèle où les panaches de liquide léger ancrées dans les zones de cristallisation entraînent en partie le liquide dense issue de la fusion locale de la graine, qui doit tendre à tapisser la surface de la graine par écoulement gravitaire. L'entraînement partiel par les panaches légers et le mélange turbulent avec le liquide sus-jacent pourraient permettre une augmentation graduelle de la concentration en éléments légers à mesure que l'on s'écarte de l'ICB. Le maintien dynamique de cette couche doit faire intervenir un équilibre entre apport de liquide dense par fusion et entraînement de cette couche par la convection dans le noyau.

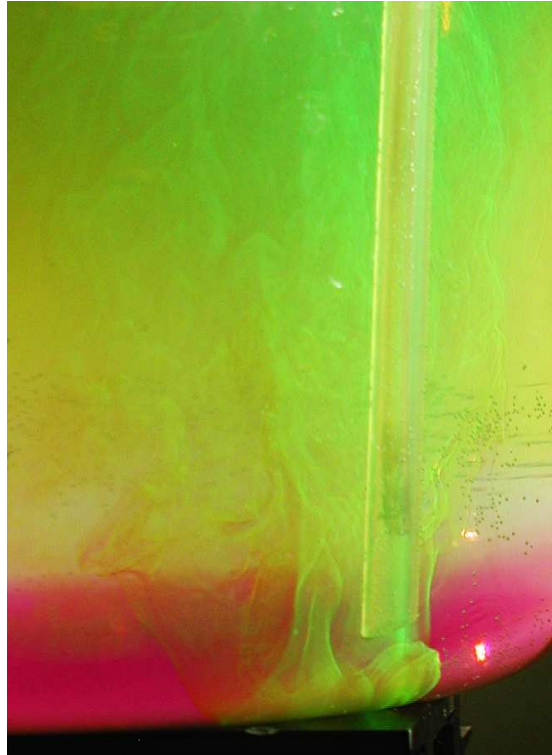


Figure 2.10 – Dans cette expérience sont injectés simultanément un liquide dense (eau salée à 8 % en masse) coloré en rose et de l'eau ~ pure chargée en fluoresceine (jaune fluorescent) dans un liquide de densité intermédiaire (eau salée à 4 % en masse, non coloré). Le liquide dense s'étend au fond du récipient et forme une couche dense qui est partiellement entraînée par les panaches de liquide léger. Notez que l'essentiel du volume au dessus de la couche dense, initialement non coloré a été coloré par la fluorescéine contenue dans les panaches légers, ce qui atteste d'un mélange efficace en volume.

Nous avons réalisé quelques expériences très préliminaires où du liquide dense (de l'eau salée, riche en sel) et du liquide léger (pauvre en sel) étaient injectés de manière simultanée à la base d'un récipient contenant une solution de densité intermédiaire. Les deux liquides étaient colorés de manière différente de manière à visualiser le devenir des différentes masses d'eau. Les très faibles diffusivité du sel et des colorants permettent de suivre le liquide injecté et de mettre en évidence un éventuel mélange entre les différents liquides. Ces expériences montrent qu'il est effectivement possible de construire une couche dense stratifiée, suivant la valeur du rapport entre les flux de liquide dense et de liquide léger (*c.f.* figure 2.10). Il reste maintenant à effectuer des expériences plus quantitatives, à mettre en évidence les paramètres contrôlant la dynamique d'une telle couche et à explorer de manière systématique leurs effets sur la présence et la structure d'une couche stratifiée. Pour une application au noyau, il sera nécessaire de comprendre et d'évaluer la possibilité de fusion localisée à la surface de la graine, ainsi que de quantifier l'effet d'entraînement par la convection ambiante dans le noyau liquide.

3 Cristallisation sous un fort champ de gravité

3.1 Introduction

Fearn *et al.* (1981) ont montré que si le régime de cristallisation de la graine était dendritique, du liquide piégé dans la matrice solide pouvait subsister jusqu'à des profondeurs importantes dans la graine, peut être même jusqu'à son centre. La même conclusion peut être tirée si la graine croît par sédimentation de grains cristallisés à proximité de la graine. Cette conclusion vient du fait que l'écart entre le géotherme et le profil de température de solidification (à concentration constante) est relativement petit comparé à l'échelle des variations de température induites par des changements de composition. La cristallisation partielle d'une poche de liquide en réponse au refroidissement séculaire s'accompagne d'un enrichissement en éléments légers suffisant pour abaisser la température de cristallisation et maintenir la phase liquide en équilibre thermodynamique avec la phase solide. En utilisant l'expression trouvée dans Deguen & Cardin (2009) (annexe pages 162-164) pour le profil de température dans la graine, on trouve que l'écart au centre de la graine entre la température et la température de cristallisation à la concentration initiale c_0 est de l'ordre de

$$\Delta T = T_s(r = 0, c = c_0) - T(r = 0) \simeq \frac{1}{2} \frac{m_p \rho g' r_i c^2}{1 + \tau_\kappa / \tau_{ic}} \quad (3.1)$$

où $g' = dg/dr$ et $\tau_\kappa = r_{ic}^2 / 6\kappa$ est le temps de diffusion thermique dans la graine. Pour un âge de 1.5 Ga, on obtient $\Delta T \simeq 150$ K. Pour accommoder cette différence de température, le liquide résiduel doit être enrichi de $\Delta c = m_c^{-1} \Delta T \sim 2$ wt. % pour une pente de liquidus de 70 K.wt.%⁻¹ (Alfè *et al.*, 2002a). Pour enrichir le liquide résiduel de cette quantité, il suffit de cristalliser une fraction solide égale à

$$\phi = 1 - \frac{c_0}{c_0 + \Delta c} = \frac{m_c^{-1} \Delta T}{c_0 + m_c^{-1} \Delta T}, \quad (3.2)$$

de l'ordre de 16 % pour $m_c = 70$ K.wt.%⁻¹. Si aucun transport de soluté n'avait lieu, la fraction solide serait donc de l'ordre de 15 % au centre de la graine et diminuerait de manière continue jusqu'à être nulle à l'ICB.

La rigidité de la graine démontrée par les modes propres (Dziewonski & Gilbert, 1971) et le saut de densité à l'ICB montrent que la fraction solide dans la graine y est bien supérieure. De toute évidence, d'autres processus doivent entrer en jeu.

L'un est la convection du liquide interstitiel : à l'équilibre thermodynamique, la concentration en éléments légers doit augmenter avec la profondeur de manière à contrebalancer l'écart de plus en plus grand à $T_s(c_0)$. En conséquence, le liquide résiduel est

intrinsèquement plus léger en profondeur et est donc susceptible de convecter. La convection évacue alors vers le noyau du liquide enrichi et apporte en contrepartie du liquide comparativement moins riche qui cristallisera partiellement et augmentera la fraction solide en conséquence. Loper (1983) a montré que la fraction solide devait augmenter rapidement sous l'ICB jusqu'à être de l'ordre de 1 après environ 1 km en réponse au flux d'éléments légers accompagnant la convection intersticielle.

Un autre mécanisme susceptible de jouer sur la fraction solide dans la graine est la compaction de la matrice solide. Le fer solide étant plus dense que la phase liquide, la matrice solide peut se compacter sous son propre poids et évacuer vers le noyau le liquide interstitiel enrichi en éléments légers. Sumita *et al.* (1996) ont montré que l'essentiel de la compaction avait lieu dans une fine couche à la surface de la graine dont l'épaisseur δ_c résulte d'une compétition entre la croissance de la graine et la déformation,

$$\delta_c = \sqrt{\frac{\eta V}{\Delta \rho g}} \simeq \left(\frac{\eta}{10^{16} \text{ Pa.s}} \right)^{1/2} \times 5 \text{ m} \quad (3.3)$$

où V est la vitesse d'avancée de l'ICB, $\Delta \rho$ le contraste de densité entre les phases solide et liquide, η la viscosité solide et g la gravité. Cette distance peut aussi être construite à partir du rapport entre le temps de relaxation $\eta/(\Delta \rho g \delta_c)$ et le temps de croissance de cette couche, δ_c/V . La viscosité du fer aux conditions de la graine est très mal connue, les valeurs publiées variant entre 10^{11} Pa.s et 10^{21} Pa.s. Même avec une viscosité forte, 10^{21} Pa.s, on obtient $\delta \sim 1.5$ km, une distance très petite comparée au rayon de la graine. La fraction solide doit donc atteindre une valeur de l'ordre de 1 moins d'un kilomètre sous la surface de la graine. En dessous de cette couche, une porosité résiduelle peut exister, dont la valeur dépend fortement de la perméabilité de la matrice. Sumita *et al.* (1996) obtiennent dans leur modèle une porosité résiduelle inférieure à 10 %.

Nous avons développé un dispositif expérimental permettant d'étudier ces deux aspects lors de la cristallisation dendritique d'un mélange binaire. L'approche choisie consiste à imposer un fort champ de gravité apparent lors de la cristallisation, au moyen d'une centrifugeuse. Avec une centrifugeuse couramment utilisée en chimie, des accélérations centrifuge de l'ordre de quelques milliers de fois la gravité terrestre peuvent être atteinte. Cette forte gravité apparente peut permettre d'intensifier la convection associée à la cristallisation et augmenter les flux de chaleur et soluté qui y sont associé. En laboratoire, la compaction d'un milieu biphasique sous son propre poids est insignifiante car la distance δ_c est très grande comparée aux dimensions d'une expérience raisonnable. La seule manière envisageable pour étudier expérimentalement ce phénomène consiste à augmenter la gravité, tout en choisissant un matériau facilement déformable.

À ce jour, le dispositif est toujours en cours de mise au point, de nombreuses difficultés techniques ayant été rencontrées, en raison de la forte gravité imposée. Les premières expériences, dont la plupart ont du être interrompue prématurément, ont porté sur l'effet d'une convection vigoureuse sur la cristallisation d'un mélange binaire. Des résultats très préliminaires sont présentés dans ce chapitre.

3.2 Convection dans une zone dendritique - Phénoménologie

La cristallisation d'un mélange biphasique s'accompagne généralement d'une redistribution spatiale de soluté et de chaleur, qui peut dans certaines conditions nourrir des

mouvements de convection. La cristallisation d'eau salée par le haut (*e.g.* la banquise), par exemple, forme de la glace d'eau presque pure et rejette préférentiellement le sel dans la phase liquide. Le résidu de la cristallisation est un liquide froid et riche en sel, plus dense que l'eau salée et donc instable dans un champ de gravité. Cette redistribution locale peut avoir des conséquences à grandes échelles. Dans le cas de la cristallisation de glace de mer, le flux de flottabilité thermique et compositionnel associé à la croissance de la banquise joue un rôle fondamental dans la circulation thermohaline océanique. De même, le flux de flottabilité associé à la cristallisation de la graine contribue pour beaucoup à générer et maintenir la convection dans le noyau et la dynamo. Suivant les propriétés du liquide cristallisé et la géométrie (refroidissement par le bas ou par le haut), les champs thermiques et compositionnels peuvent être stabilisant ou déstabilisant de manière indépendante (Huppert & Worster, 1985).

Les choses se compliquent dans le cas très courant où le front de cristallisation est instable vis-à-vis de l'instabilité morphologique étudiée au chapitre précédent. Dans cette situation, le régime de solidification est dendritique, et une zone biphasique appelée *zone dendritique* ou *zone de mush*¹ se développe. La cristallisation a alors lieu non seulement au niveau du front de cristallisation séparant la zone de mush du liquide, mais aussi en volume dans la zone de mush. La redistribution de soluté et de chaleur a donc lieu en volume et le liquide interstitiel peut convecter dans certaines conditions.

Worster (1992) a montré théoriquement que deux modes de convection pouvaient être associés à la cristallisation d'une zone de mush. L'un est un mode dit de *couche limite* dont l'origine est la déstabilisation de la couche limite diffusive thermo-solutale présente au niveau du front de solidification. Le second mode, que l'on appellera *mode interne*, met en jeu le liquide interstitiel à l'intérieur de la zone de mush.

Nous utiliserons dans nos expériences des solutions aqueuses de chlorure d'ammonium $\text{NH}_4\text{Cl-H}_2\text{O}$ et on raisonnera en référence à ce système. Le diagramme de phase est présenté sur la figure 3.1. On se placera de plus dans le cas de la solidification d'un liquide super-eutectique ($c > c_e$), le solide cristallisé étant alors du chlorure d'ammonium pur. Le liquide résiduel est appauvri en chlorure d'ammonium et voit sa température de cristallisation baisser au cours de la cristallisation (*cf.* figure 3.1).

On fait l'hypothèse, généralement acceptée et bien vérifiée expérimentalement (*e.g.* Worster, 1997), que l'intérieur de la zone de mush est à l'équilibre thermodynamique. Cela a pour conséquence de coupler la composition et la température du liquide interstitiel *via* la relation du liquidus,

$$T = T_0 + m_c(c - c_0), \quad (3.4)$$

où c est la concentration en chlorure d'ammonium dans la phase liquide, T_0 la température de solidification à la concentration c_0 , et m_c la pente du liquidus. Les variations de température et de concentration du liquide interstitiel s'accompagnent de variations de densité, que l'on supposera petites devant la densité moyenne et que l'on décrira avec une équation d'état linéarisée,

$$\rho = \rho_0 [1 - \alpha(T - T_0) + \beta(c - c_0)] \quad (3.5)$$

¹Le terme *zone de mush* est plus général, et s'applique à tout milieu biphasique où le solide forme une matrice continue. Une zone dendritique est une zone de mush dont la matrice solide est formée de cristaux dendritiques. Les deux termes seront utilisés de manière équivalente dans la suite.

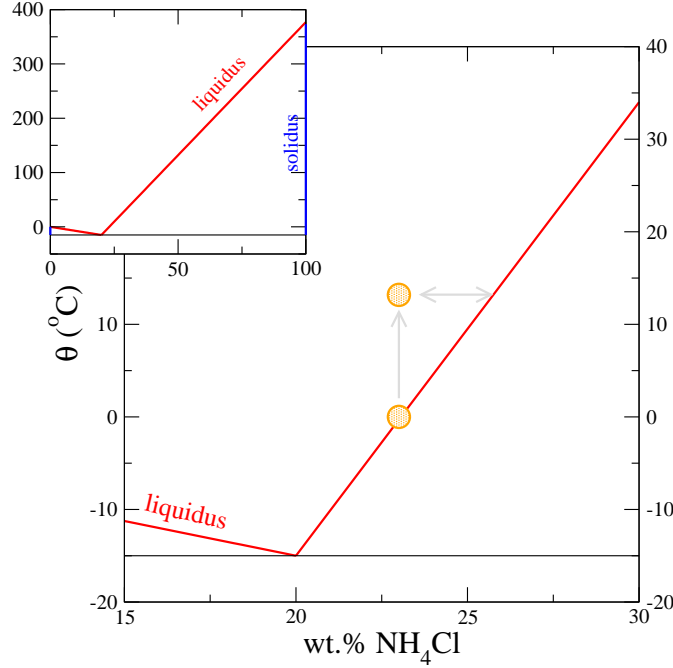


Figure 3.1 – Diagramme de phase (T, c) du système binaire $\text{NH}_4\text{Cl-H}_2\text{O}$. Le point eutectique est situé à $c_e = 19.7$ wt.% et $T_e = -15.9$ °C. Le liquidus est donné par $T_L = -15.9 + 4.9(c - 19, 7)$ pour $c > c_e$ ($m_c = 4.9$ wt.%), et $T_L = -0.8c$ pour $c < c_e$.

où ρ_0 est la densité moyenne du liquide, α est le coefficient d'expansion thermique et β le coefficient d'expansion compositionnelle. α et β sont tous deux définis de manière à être positifs : la densité est une fonction décroissante de la température et une fonction croissante de la concentration en chlorure d'ammonium. L'hypothèse d'équilibre thermodynamique permet de réécrire ρ dans la zone de mush comme une fonction de c uniquement,

$$\rho = \rho_0 [1 + \beta^*(c - c_0)], \quad (3.6)$$

où $\beta^* = \beta - m_c \alpha$ est un coefficient d'expansion effectif résultant des contributions des changements de température et de composition. Pour le système $\text{NH}_4\text{Cl-H}_2\text{O}$, $\alpha = 3.1 \times 10^{-4} \text{ K}^{-1}$, $\beta = 2.3 \times 10^{-3} \text{ wt \%}^{-1}$ et $m_c = 4.9 \text{ K.wt \%}^{-1}$, on trouve $\beta^* = 7.8 \times 10^{-4} \text{ wt \%}^{-1}$ (Tait & Jaupart, 1992). Les variations de densité sont dominées par l'effet de la composition, ce qui amène à la situation inhabituelle où le liquide est d'autant plus léger qu'il est froid. Dans le cas d'une solution refroidie et cristallisée par le bas, le liquide interstitiel développe alors une stratification instable et est susceptible de convecter.

On peut obtenir une équation pour la vitesse du liquide interstitiel en moyennant l'équation de Navier-Stokes, écrite dans le cadre de l'approximation de Boussinesq, sur un volume mésoscopique. On considère le système en rotation à un taux de rotation Ω et on suppose la matrice solide immobile. On obtient alors, après un certain nombre de manipulations (voir par exemple Le Bars & Worster (2006) pour la procédure de prise

de la moyenne),

$$\rho_0 \left[\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \left(\frac{\mathbf{u}}{\chi} \right) \right] + 2\rho_0 \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{u} = -\chi \left[\nabla p - (\rho - \rho_0)\mathbf{g} + \frac{\eta}{\Pi(\chi)}\mathbf{u} \right] + \eta \nabla^2 \mathbf{u} \quad (3.7)$$

où χ est la fraction liquide, \mathbf{u} est la vitesse de Darcy, égale à $\chi[\mathbf{u}^\ell]$ où $[\mathbf{u}^\ell]$ est la vitesse locale moyenne du liquide intersticiel, p la pression dans la phase liquide, \mathbf{g} l'accélération de la gravité, η la viscosité dynamique et $\Pi(\chi)$ la perméabilité.

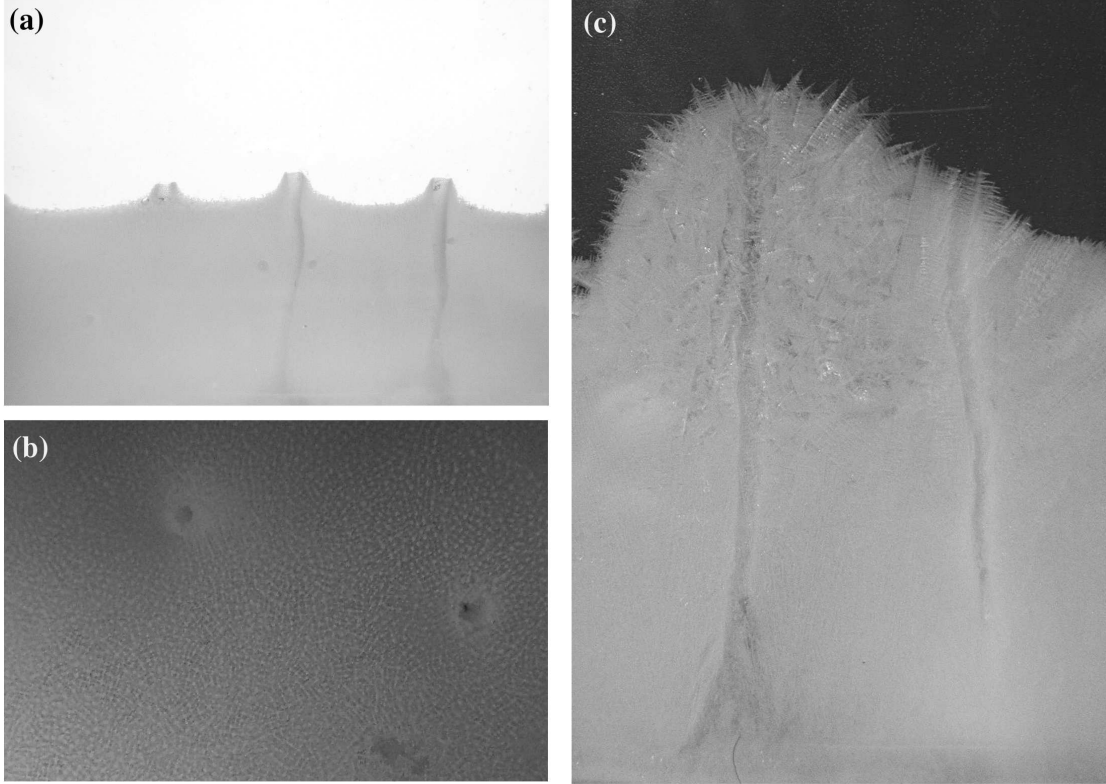


Figure 3.2 – Zones dendritiques cristallisées à partir de solutions aqueuses de chlorure d'ammonium. Les photos (a) et (c) ont été prises lors d'expériences en cellules de type Hele-Shaw, de dimensions $21 \text{ cm} \times 9.5 \text{ cm} \times 8 \text{ mm}$. La photo (a) montre le développement de cheminées, vues en coupe, dans la zone dendritique. La photo (b), prise lors d'une expérience dans un conteneur de dimension $9 \text{ cm} \times 9 \text{ cm} \times 15 \text{ cm}$, montre une vue du front de solidification dendritique, où les cheminées sont apparentes. La photo (c) présente les résultats d'une expérience effectuée dans la cellule Hele-Shaw à partir d'une solution initialement très légèrement sous-saturée. Lors de cette expérience, des cristaux dendritiques équiaxes se sont formés autour des panaches froids issus des cheminées et ont sédimenté préférentiellement autour des cheminées, formant la zone très poreuse située aux sommets des conduits. Ces cristaux équiaxes ont vraisemblablement grandi à partir de germes transportés par les panaches issus des cheminées, et on pu se développer dans le liquide rendu sursaturé en raison du refroidissement induit par les panaches.

On adimensionne cette équation en choisissant comme échelles caractéristiques H pour les longueurs, $\tau_\kappa = H^2/\kappa$ pour t , κ/H pour les vitesses. On choisit une échelle

de pression basée sur la friction de Darcy, $\eta\kappa/\Pi_0$ et on définit une température (ou concentration) adimensionnée par

$$\theta = \frac{T - T_0}{T_0 - T_b} = \frac{m_c(c - c_0)}{m_c(c_0 - c_b)} = \frac{c - c_0}{\Delta c}, \quad (3.8)$$

où $\Delta c = c_0 - c_B$. On obtient alors l'équation de conservation de la quantité de mouvement sous une forme adimensionnée

$$DaPr^{-1} \left[\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \left(\frac{\mathbf{u}}{\chi} \right) \right] + 2Ek^{*-1} \mathbf{e}_\Omega \times \mathbf{u} = -\chi \left[\nabla p + R_m \theta \mathbf{e}_z + \frac{\Pi_0}{\Pi(\chi)} \mathbf{u} \right] + Da \nabla^2 \mathbf{u} \quad (3.9)$$

où \mathbf{e}_z est un vecteur unitaire parallèle à \mathbf{g} et \mathbf{e}_Ω un vecteur unitaire parallèle à Ω . On a introduit le nombre de Darcy Da , le nombre de Prandtl Pr , un nombre d'Ekman poreux Ek^* et un nombre de Rayleigh R_m pour la zone de mush, définis comme

$$Da = \frac{\Pi_0}{H^2}, \quad Pr = \frac{\nu}{\kappa}, \quad Ek^* = \frac{E}{Da} = \frac{\nu}{\Omega \Pi_0}, \quad R_m = \frac{\beta^* \Delta c \Pi_0 H g}{\nu \kappa}. \quad (3.10)$$

Le nombre de Darcy compare les forces visqueuses associées aux grandes échelles de l'écoulement aux forces opérant à l'échelle des pores. En d'autres termes, il compare l'échelle spatiale sur laquelle les forces visqueuses opèrent - la dimension d'un pore, de l'ordre de $\sqrt{\Pi_0}$ - à l'échelle spatiale de l'écoulement H . Pour une zone dendritique formée à partir d'une solution de chlorure d'ammonium, une valeur typique de la perméabilité est $\sim 10^{-8} \text{ m}^2$, ce qui donne, pour $H \sim 10 \text{ cm}$, $Da \sim 10^{-6}$. Le nombre de Prandtl est de l'ordre de 6. On peut alors négliger le terme d'inertie et le terme $Da \nabla^2 \mathbf{u}$ pour obtenir une équation de Darcy prenant en compte la force de Coriolis

$$\mathbf{u} = \frac{\Pi(\chi)}{\Pi_0} \left\{ -\nabla p - R_m \theta \mathbf{e}_z - \frac{2}{\chi} Ek^{*-1} \mathbf{e}_\Omega \times \mathbf{u} \right\}. \quad (3.11)$$

Le nombre d'Ekman défini ci-dessus compare la force de Coriolis à la résistance visqueuse de la matrice. Il peut aussi être vu comme un nombre d'Ekman défini à partir d'une longueur de l'ordre de la taille des pores. Ek^* est significativement plus grand que Ek et on peut s'attendre à ce que la rotation joue comparativement un rôle moins important dans la zone de mush que dans le domaine liquide.

De manière générale, le nombre de Rayleigh R_m critique dépend des propriétés physiques du mélange binaire (Worster, 1992), mais est généralement de l'ordre de 10. Tait & Jaupart (1992) obtiennent expérimentalement $R_m^c \simeq 25$.

L'équation de Darcy qui gouverne l'écoulement ne présente rien qui puisse différencier une zone de mush d'un milieu poreux classique. Pourtant, le fait que la matrice et le liquide interstitiel soient deux phases proches de l'équilibre thermodynamique apporte une différence fondamentale : une zone de mush est un milieu poreux *réactif*. La porosité, et donc la perméabilité, varient avec l'espace et le temps en réponse à l'évolution globale du système mais aussi en réponse à l'écoulement du liquide interstitiel. La diffusivité chimique étant petite comparée à la diffusivité thermique, une parcelle de fluide transportée verticalement dans la zone de mush s'équilibre thermiquement avec le fluide environnant, mais pas chimiquement. Si cette parcelle était initialement en équilibre thermodynamique avec la phase solide, son transport vertical l'éloigne de l'équilibre

(cf. figure 3.1). Si la parcelle est déplacée vers le haut, elle se retrouve dans un environnement plus riche en soluté et est alors sous-saturée ; l'équilibre est rétabli par la dissolution partielle de la matrice solide. À l'inverse une parcelle déplacée vers le bas se retrouve sursaturée et l'équilibre est rétabli par la croissance de la phase solide. L'importance des changements de phase accompagnant l'écoulement est apparent dans la forme que prend la convection développée dans une zone de mush. La convection prend la forme de fins panaches localisés dans des conduits dépourvus de solide, appelés *cheminées* (cf. figure 3.2), l'écoulement descendant se faisant en volume dans la zone de mush. La formation de ces cheminées découle directement d'une rétroaction entre dissolution et écoulement. La matrice solide tend à être dissoute dans les zones d'upwelling, ce qui diminue la perméabilité et la résistance à l'écoulement. L'écoulement montant est intensifié, ce qui accélère la dissolution. Cette boucle de rétroaction se poursuit jusqu'à focaliser l'écoulement dans des cheminées formées par la dissolution complète de la matrice solide.

La croissance de la zone de mush s'accompagne de la formation de couches limites thermique et compositionnelle à la base du domaine liquide. Dans le liquide, température et composition ne sont plus liées par la relation du liquidus et se comportent de manière indépendante. Dans le cas de la cristallisation d'une solution de chlorure d'ammonium par le bas, cette couche est appauvrie en chlorure d'ammonium à sa base par rapport au domaine liquide et tend donc à être instable. Le profil thermique en revanche est stabilisant, la température étant plus froide à la base de la couche. La convection initiée dans cette couche est de type double-diffusive et prend la forme de fins panaches ancrés dans la couche limite, similaires à ce qui est observé dans le régime 'doigts de sels' de la convection thermo-haline (*e.g.* Chen & Chen, 1991; Tait *et al.*, 1992; Tait & Jaupart, 1992).

Dans les expériences typiques de laboratoire, le nombre de Rayleigh R_m est intrinsèquement limité : l'épaisseur de la zone de mush peut difficilement dépasser quelques centimètres et la différence de composition est limitée par le diagramme de phase. Ces limitations peuvent être levées en effectuant des expériences sous forte gravité, qui permettent d'augmenter considérablement le forçage convectif.

3.3 Dispositif expérimental

Le dispositif expérimental, présenté sur la figure 3.3, consiste en une chambre de cristallisation de dimension 35 mm \times 35 mm \times 75 mm isolée thermiquement par des parois en polycarbonate de 1 cm d'épaisseur, et refroidie à sa base à travers une plaque de duraluminium de 5 mm d'épaisseur auquel est rapportée une cellule Peltier capable d'extraire des flux de chaleur de l'ordre de 40 W. Cette chambre est isolée à nouveau par un tube de polycarbonate d'épaisseur 1.5 cm et adaptée dans un rotor à 'godets basculants' (Beckman JS-4.3) en aluminium, pouvant être entraîné en rotation à des vitesses allant jusqu'à 4300 rpm. Pour fonctionner, la cellule Peltier doit être refroidie sur une de ces faces. Ces cellules fonctionnent par effet thermoélectriques : un courant électrique induit un flux de chaleur entre les deux faces, l'une se refroidissant alors que l'autre se réchauffe. Le Peltier perd de son efficacité si la température de la face chaude augmente trop et on doit donc réguler cette température et évacuer l'excès de chaleur. La solution retenue a été de coupler thermiquement la face chaude de la cellule Peltier avec le godet du rotor qui est un bon conducteur thermique (duraluminium) et est

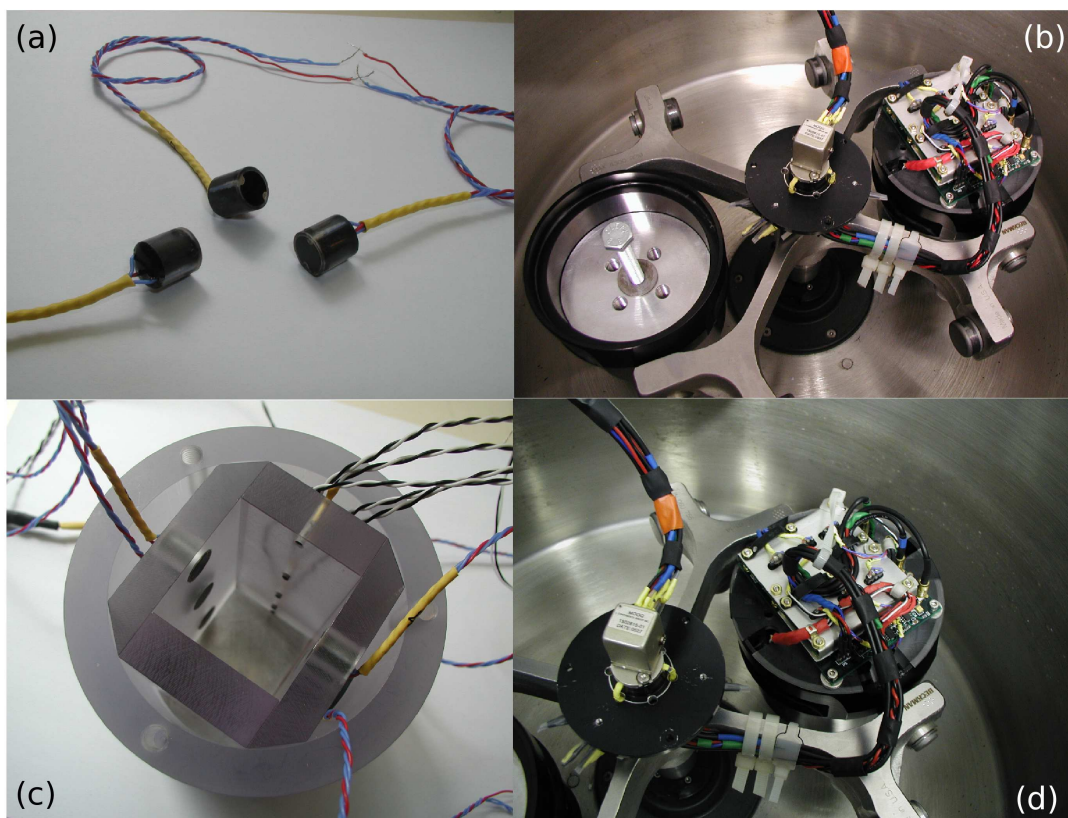
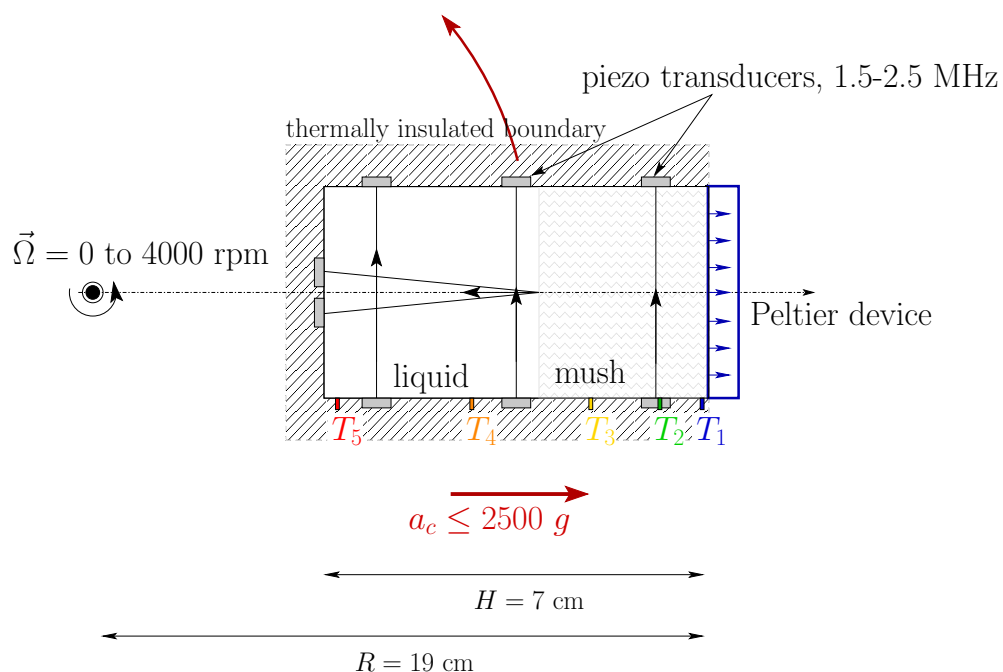


Figure 3.3 – Haut : Schéma de principe de l'expérience de cristallisation sous forte gravité. **Bas :** Photos du dispositif. (a) Sondes ultrasonores. (b) Le rotor dans la cuve de la centrifugeuse. Le godet de droite contient la chambre de cristallisation. L'électronique embarquée est apparente. Le godet de gauche contient un contrepoids. (c) La chambre de cristallisation, avec les sondes ultrasonores transverses et les sondes de température. (d) Une vue rapprochée du rotor.

refroidi naturellement par la rotation rapide du rotor. La centrifugeuse utilisée dans ces expériences, prêtée par l'équipe Géochimie du LGIT, permet de réguler la température dans la cuve et de maintenir le godet et la cellule Peltier à la température voulue.

Lors de la conception, on a tenté de limiter au maximum les pertes thermiques à travers les parois de manière à contrôler le refroidissement au mieux et d'assurer un flux de chaleur vertical prédominant. La tâche n'est pas facile car le volume de la chambre de cristallisation est petit et son évolution thermique est sensible à des pertes même petites à travers les parois. Pour limiter au maximum ces pertes, on imposera une température dans la cuve de la centrifugeuse proche de celle de la chambre de cristallisation.

Cinq sondes de température (sondes platine PT100) sont insérées dans une des parois verticales de la chambre et permettent de mesurer le profil de température vertical. Une sixième sonde est insérée dans la plaque de duraluminium en contact avec la face froide du Peltier et mesure donc la température imposée à la base de la chambre.

Des couples de sondes ultrasonores, conçues et réalisées par Patrick La Rizza, Jean-Paul Masson et moi-même, sont insérées dans les parois verticales et dans la paroi horizontale supérieure. Ces sondes ont une bande passante d'environ 2 MHz centrée autour de 3 MHz et ont une réponse fréquentielle satisfaisante dans cette bande fréquentielle. L'amortissement des fréquences de résonance est cependant moins bon que celui de sondes 'professionnelles' et ces fréquences polluent en partie le signal. L'effet est important si on émet des pulses très courts, mais est moins gênant si on utilise des signaux longs de type 'sweep' (signaux à fréquence variable au cours du temps), recompressés par corrélation. On utilise le plus souvent des sweeps linéaires sur une bande de fréquence [1 MHz-3 MHz], d'une durée de 1 ms. La réponse impulsionnelle du milieu est estimée en corrélant le signal émis avec le signal reçu. Le couple de sondes situé sur la paroi horizontale supérieure permet de suivre l'avancée du front de solidification au cours de l'expérience à partir des temps de trajet de l'onde réfléchi sur l'interface mush/liquide. Les couples de sondes transverses permettent de mesurer l'évolution de la vitesse de propagation dans le milieu. Les signaux acoustiques sont générés par un générateur HF Agilent 33220A et les signaux sont reçus par une carte d'acquisition NI PXI-1036 permettant un échantillonnage à une fréquence de 20 MHz.

La puissance nécessaire au fonctionnement du module Peltier et les signaux électriques sont transmis entre le référentiel du laboratoire et l'expérience en rotation par un collecteur tournant (MOOG EC 3848) disposant de 10 voies, permettant la transmission électrique jusqu'à des vitesses de rotation de 10 000 rpm. Le nombre de voies est insuffisant pour permettre la transmission simultanée des signaux de température, des signaux acoustiques et de la puissance réclamée par le module Peltier. Une électronique embarquée a été conçue par Patrick La Rizza pour contourner ce problème. Un multiplexeur temporel est utilisé pour les signaux acoustiques - les couples de piezzos sont utilisés alternativement - et l'ensemble des mesures des six sondes de températures sont regroupées en un seul signal. Les signaux sont amplifiés par l'électronique embarquée avant la transmission par le collecteur tournant pour limiter au maximum la détérioration du signal. Le bruit du moteur de la centrifugeuse pollue significativement les signaux acoustiques, mais disparaît après corrélation.

3.4 Étude de la réponse acoustique d'une zone dendritique

En préliminaire à l'expérience en centrifugeuse, nous avons cherché à étudier la réponse acoustique d'une zone dendritique, en collaboration avec Philippe Roux. Nous avons utilisé pour ces expériences des solutions aqueuse de chlorure d'ammonium, à des concentrations comprises entre 26 wt.% et 28 wt.%, cristallisées dans un récipient de dimension $8\text{ cm} \times 8\text{ cm} \times 15\text{ cm}$. On utilise des barettes acoustiques de 64 éléments piezoélectriques de fréquence nominale 3.5 MHz. Au cours de la cristallisation, des pulses d'une durée de quelques périodes sont régulièrement émis par chacun des éléments, et le champ d'ondes réfléchi par la zone dendritique est enregistré par les 63 autres.

La figure 3.4 montre un exemple typique de signal réfléchi par la zone dendritique. La réflexion à l'interface mush/liquide, assez peu énergétique, est suivie par une longue coda qui montre le caractère très diffusant de la zone dendritique. Dans les conditions de l'expérience, l'espacement interdendritique est typiquement de l'ordre du millimètre, du même ordre que les longueur d'ondes émises (autour de 0.5 mm), et cette coda pourrait être attribuée à des processus de diffusion/reflexion sur les dendrites et leurs bras secondaires. L'énergie dans la coda décroît de manière exponentielle (figure 3.4). Si cette décroissance est interprétée comme étant due à la diffusion dans la zone dendritique, le taux de décroissance de l'énergie permet d'estimer un libre parcours moyen de l'onde, qui est de l'ordre de 2 à 3 mm pour cette expérience. Cette valeur semble cohérente avec l'échelle spatiale des hétérogénéités dans la zone dendritique. Nous avons espéré pouvoir relier ce libre parcours moyen à des variations d'espacement interdendritique ou de fraction solide entre différentes expériences, mais nous n'avons pas observé de tendances suffisamment marquées pour permettre la caractérisation du milieu. Cette diffusion semble induire une atténuation forte et très dépendante de la fréquence, comme le montre le spectrogramme représenté figure 3.5.

Nous avons aussi tenté d'utiliser des techniques d'imagerie acoustique, similaires à celles classiquement utilisées en imagerie médicale, pour imager la zone dendritique. Nous avons utilisé deux types de barettes de 64 éléments, de fréquences centrales 1 MHz ($\lambda = 1.5\text{ mm}$) et 3.5 MHz ($\lambda = 0.4\text{ mm}$). Les résultats sont mitigés. La principale difficulté rencontrée, qui semble difficilement contournable, vient de la forte atténuation des hautes fréquences à l'intérieur de la zone dendritique. Le pouvoir de résolution est donc intrinsèquement limité par le milieu. Le sommet de la zone dendritique est relativement bien résolu, mais le pouvoir de résolution diminue rapidement avec la profondeur dans la zone dendritique.

3.5 Cristallisation d'une solution de NH_4Cl sous forte gravité

3.5.1 Résultats expérimentaux préliminaires

Des quelques tentatives d'expériences sous forte gravité, une seule a pour l'instant donné des résultats exploitables. Il s'agit d'une expérience à 1000 rpm (200 g) de cristallisation d'une solution de chlorure d'ammonium de concentration $c_0 = 27\text{ wt.}\%$. À cette composition correspond une température de solidification $T_s(c_0) = 19^\circ\text{ C}$. La température initiale du liquide était $T_0 = 29^\circ\text{ C}$ et une température $T_b \simeq 5^\circ\text{ C}$ a été imposée à la base de la chambre de cristallisation après un transitoire d'environ 15 min. L'expérience a été interrompue de manière prématurée en raison d'un dysfonctionnement

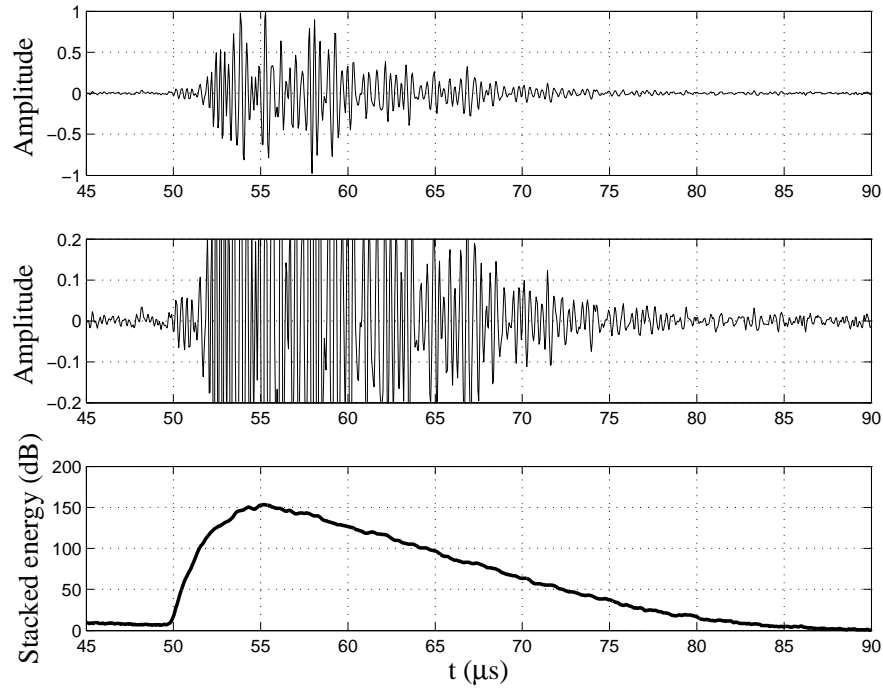


Figure 3.4 – Signal réfléchi et rétrodiffusé par une zone dendritique, dans une expérience de cristallisation d'une solution de chlorure d'ammonium de concentration 27 wt.%. La figure du milieu est un zoom en amplitude de la figure du haut. La figure du bas présente un stack sur 64 réalisations de l'énergie du signal enregistré.

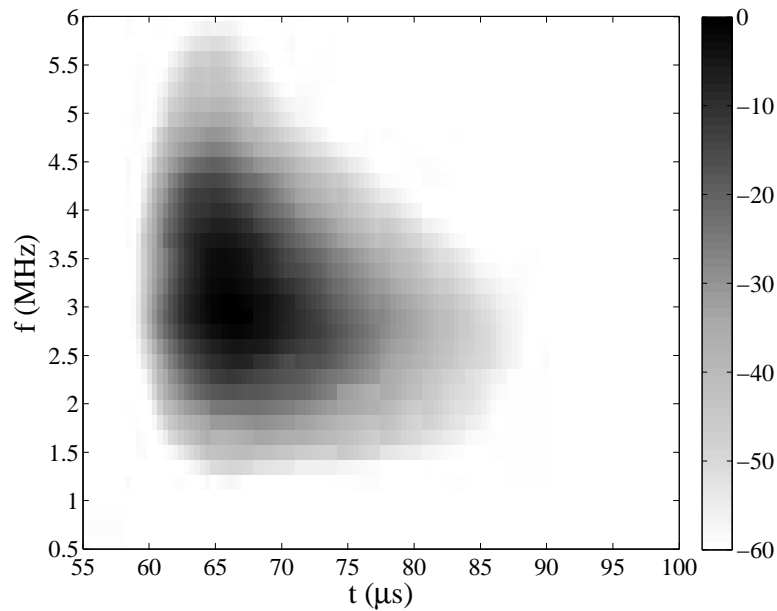


Figure 3.5 – Spectrogramme, moyenné sur 64 réalisations, du signal réfléchi et rétrodiffusé par une zone dendritique de chlorure d'ammonium. Le sommet de la zone dendritique est situé au temps $t = 60 \mu\text{s}$.

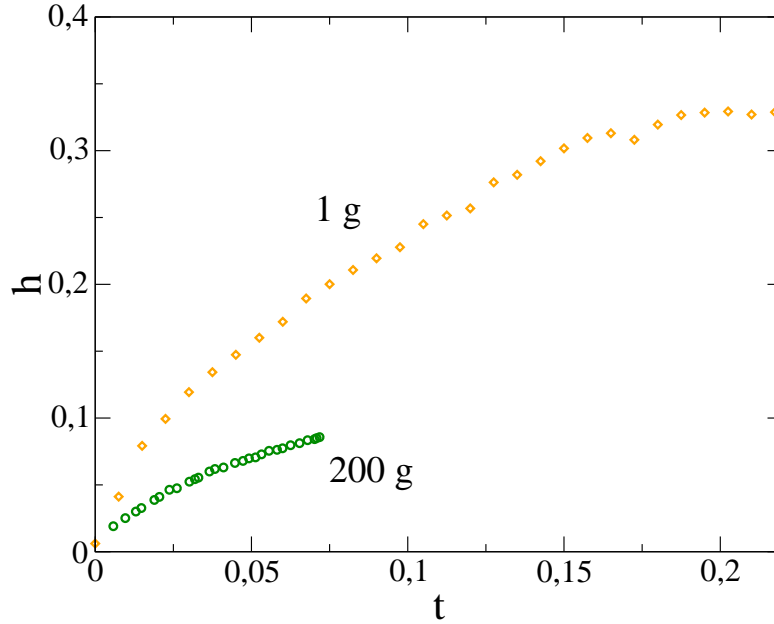


Figure 3.6 – Évolution de l'épaisseur h de la zone dendritique en fonction du temps t , adimensionnés par H et H^2/κ respectivement. Données expérimentales, sous gravité ambiante (losanges oranges) et sous forte gravité (200 g , correspondant à une vitesse de rotation $\Omega = 1000$ rpm; cercles verts).

de la cellule Peltier au bout d'un peu plus d'une heure, et les mesures de température ont été très perturbées par des problèmes de fuites électriques, mais les sondes ultrasonores ont bien fonctionné et la morphologie de la zone dendritique a pu être observée visuellement à la fin de l'expérience.

La figure 3.6 montre l'évolution de l'épaisseur de la zone dendritique en fonction du temps, déduite des temps de trajet de l'onde ultrasonore réfléchi sur l'interface. Les résultats de l'expérience sous forte gravité (cercles verts) sont comparés avec les résultats d'une expérience sous gravité ambiante (losanges oranges) réalisée avec des conditions thermiques (température initiale, T_b) identiques. La différence est remarquable : la vitesse d'avancée du front de cristallisation est environ deux fois plus faible sous forte gravité que sous gravité ambiante. L'observation visuelle de la zone cristallisée (figure 3.7) montre une zone dendritique dont la fraction solide semble être forte. L'espacement interdendritique est petit (inférieur à 0.1 mm) comparé à une expérience équivalente sous gravité terrestre où il est de l'ordre de 1 mm. L'observation la plus étonnante est l'absence de cheminée. Malgré la forte gravité, aucune trace de convection n'est visible dans la zone dendritique. Enfin, une couche épaisse d'environ 3 mm située au niveau du front de cristallisation présente une porosité beaucoup plus forte que le reste de la zone dendritique et un espacement interdendritique plus grand qu'en volume. C'est cette couche qui est visible sur la figure 3.7. Cette couche s'est vraisemblablement cristallisée entre l'arrêt de l'expérience et la prise de la photographie (le démontage du dispositif et l'ouverture de la chambre de cristallisation nécessite une quinzaine de minutes) et il ne faut sans doute pas donner trop de sens à sa présence. Un point intéressant néanmoins est le manque de continuité spatiale de l'orientation des dendrites dans cette couche (à comparer par exemple avec la figure 2.1 page 30). Dans la figure 2.1, la cohérence

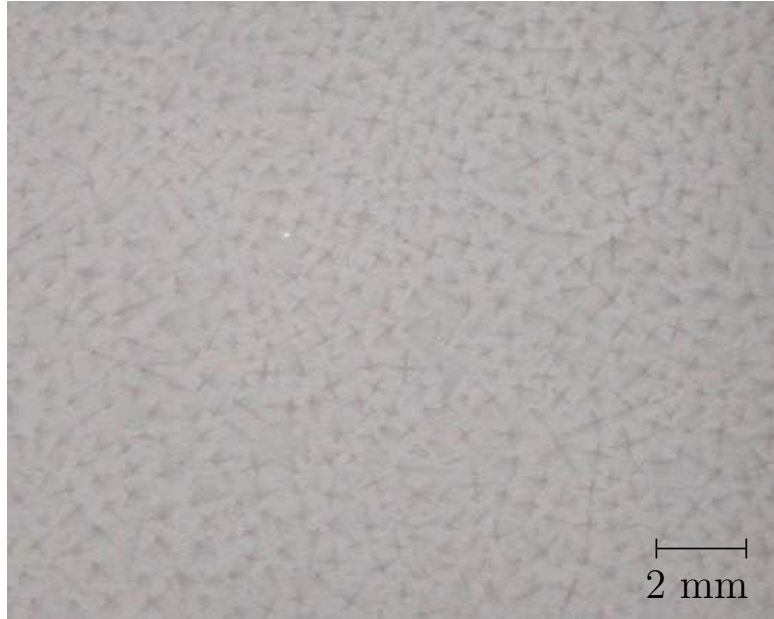


Figure 3.7 – Zone dendritique cristallisée lors d’une expérience sous une gravité de 200 g (vitesse de rotation $\Omega = 1000$ rpm), vue perpendiculairement au front de cristallisation.

spatiale de l’orientation des dendrites vient du fait que chaque grain cristallin est composé de plusieurs dendrites. Les bras secondaires des dendrites se développant suivant des axes cristallins préférentiels, l’orientation de ces bras est identique entre dendrites appartenant au même grain. L’orientation désordonnée des dendrites observées sur la figure 3.7 pourrait donc témoigner d’une taille de grains plus petite dans l’expérience sous forte gravité, de l’ordre du millimètre, ce qui est cohérent avec l’observation d’un petit espacement interdendritique. Lorsque la rotation du conteneur a été stoppée, la solidification de la solution s’est poursuivie dans des conditions (gravité ambiante) telles que l’espacement interdendritique privilégié est de l’ordre de 0.5 à 1 mm comme observé sur la figure 3.7.

3.5.2 Interprétation

Une manière d’expliquer l’absence de cheminées et la relativement forte fraction solide est d’invoquer une compétition entre les deux modes de convection associés à la croissance d’une zone de mush. Expérimentalement, on observe que le mode de couche limite devient instable avant le mode de convection interne (Chen & Chen, 1991; Tait & Jaupart, 1992; Tait *et al.*, 1992). La structure de la zone de mush (perméabilité et température) ainsi que son épaisseur peuvent donc en principe être influencées par la convection associée à la couche limite, et ce avant que la zone de mush ne soit super-critique vis-à-vis du mode de convection interne.

Le modèle proposé ci-dessous repose pour beaucoup sur un modèle construit par Worster & Kerr (1994) pour expliquer les résultats expérimentaux étonnants de Huppert & Hallworth (1993). Huppert & Hallworth (1993) ont réalisé une série d’expériences de cristallisation de solutions aqueuses de chlorure d’ammonium contaminées par de petites quantités de sulfate de cuivre, CuSO_4 , refroidies par le bas. Dans ces conditions, une

stratification instable se développe au cours de la croissance de la zone dendritique et, pour de faibles degrés de contamination en CuSO_4 , la zone de mush se déstabilise et des cheminées se développent. En revanche, Huppert & Hallworth (1993) ont observé que l'ajout de sulfate de cuivre retarde le développement de cheminées, et va jusqu'à éliminer leur formation lorsque la concentration en sulfate de cuivre dépasse une valeur critique.

Litton (1993) a proposé une explication de ces résultats en se basant sur l'observation que la morphologie des cristaux composant la zone de mush change lorsque le degré de contamination en CuSO_4 devient grand. Sans contamination, les cristaux formant la zone de mush prennent la forme de dendrites telles que celles représentées sur la figure 2.1, page 30. Lorsque le degré de contamination est important, les cristaux deviennent de plus en plus facettés. Il est connu que les cristaux facettés demandent généralement des surfusions importantes pour croître et présentent une surface relativement éloignée de l'équilibre thermodynamique en comparaison avec des cristaux non facettés. Litton (1993) propose ainsi que la zone de mush est hors équilibre lorsque les cristaux deviennent facettés et que le liquide interstitiel est super-saturé. En conséquence, une parcelle de fluide peut s'élever dans la zone de mush sans causer de dissolution appréciable, écartant ainsi la possibilité de formation de cheminées.

Worster & Kerr (1994) ont proposé une autre explication aux résultats expérimentaux de Huppert & Hallworth (1993). Leur modèle se base aussi, de manière indirecte, sur le changement de morphologie et le déséquilibre observé par Litton (1993), mais se focalise sur le déséquilibre thermodynamique de l'interface mush/liquide. Si l'hypothèse d'équilibre thermodynamique est souvent une bonne approximation, la solidification n'en reste pas moins un processus intrinsèquement hors-équilibre. Au niveau microscopique, le taux d'attachement d'atomes sur le front de solidification est exactement nul en moyenne lorsque l'interface est à l'équilibre thermodynamique, c'est à dire lorsque la température de l'interface est égale à la température de cristallisation. Le front de cristallisation ne peut progresser que si l'interface est hors équilibre, à une température strictement inférieure à la température de solidification. La vitesse de cristallisation est en général une fonction croissante de la super-saturation $T_s(c) - T_i$ où $T_s(c)$ est la température de solidification et T_i la température de l'interface. Dans le cas d'une solution de chlorure d'ammonium, Worster & Kerr (1994) déterminent expérimentalement une loi cinétique de la forme

$$V = \mathcal{G}(T_s - T_i)^2 = \mathcal{G}\Delta T^2 \quad (3.12)$$

et observent que le coefficient \mathcal{G} diminue avec la concentration en sulfate de cuivre de plus d'un ordre de grandeur pour une concentration de 0.8 wt %.

Ce déséquilibre de l'interface intensifie la convection liée à la couche limite chimique car il induit une différence de concentration en soluté entre le voisinage de l'interface et le domaine liquide de l'ordre de $\Delta c = m_c^{-1}\Delta T$, qui est d'autant plus grande que l'écart à l'équilibre est important. Kerr *et al.* (1989, 1990) ont montré que le déséquilibre de l'interface pouvait générer une convection vigoureuse dans le domaine liquide et augmenter de manière significative les flux de soluté et de chaleur entre le mush et le domaine liquide. L'hypothèse de Worster & Kerr (1994) est que la présence de sulfate de cuivre, en augmentant l'écart à l'équilibre de l'interface, intensifie la convection induite par la couche limite et augmente les flux de chaleur et de soluté à l'interface. La déstabilisation de la couche limite permet d'évacuer du liquide résiduel appauvri en chlorure d'ammonium pour le remplacer par du liquide plus riche en chlorure d'ammonium, qui vient

se déposer au sommet de la zone de mush et augmenter la fraction solide au niveau de l'interface. Si ce mécanisme est efficace, la porosité et la perméabilité dans la zone de mush sont plus faible qu'en l'absence de convection et le nombre de Rayleigh de la zone de mush,

$$R_m = \frac{\beta^* \Delta c \Pi_0 H g}{\nu \kappa},$$

peut être sous-critique. Dans ce cas, la zone de mush reste stagnante et aucune cheminée ne se forme.

On peut envisager un modèle comparable pour expliquer l'absence de cheminées dans notre expérience, où l'intensité de la convection liée à la couche limite ne résulte pas d'un plus grand contraste de composition mais d'une plus grande gravité apparente. En rotation rapide, la forte gravité pourrait intensifier la convection associée à la couche limite et augmenter les flux de chaleur et de soluté. Cela résulterait en une zone dendritique moins poreuse et moins perméable, et pourrait retarder l'initiation de la convection interne. La gravité influence aussi le nombre de Rayleigh de la zone de mush cependant, et devrait aussi faciliter la convection en volume. La sous-partie suivante présente un modèle de cristallisation d'une zone dendritique, qui reprend essentiellement le modèle de Worster & Kerr (1994), prenant en compte le transfert convectif de chaleur et de concentration lié à la couche limite

3.5.3 Modélisation

On étudie ici le comportement de la zone de mush avant que celle-ci ne soit super-critique vis-à-vis du mode de convection en volume et on considère donc que le liquide interdendritique est stagnant. Le modèle est schématisé sur la figure 3.8. On refroidit une solution de chlorure d'ammonium, initialement à la température T_0 et la concentration c_0 , en imposant à la base du récipient une température T_b inférieure à la température de cristallisation $T_s(c_0)$ à la concentration c_0 . Une zone dendritique cristallise à partir de la base du récipient et grandit vers le haut, l'interface mush/liquide est située en $z = h$ au temps t . La température et la concentration au niveau de l'interface sont égales à T_i et c_i respectivement. Dans le domaine liquide, la température T^ℓ et la concentration c^ℓ sont homogènes, et se raccordent aux profils de température et de concentration dans la zone dendritique par deux couches limites. Le profil thermique à la base du domaine liquide est stabilisant, mais le profil de concentration est déstabilisant, du fait que la concentration et donc la densité sont plus petits au sommet de la zone de mush que dans le domaine liquide. On suppose que la différence de concentration $\Delta c = m_c^{-1} \Delta T$ génère une convection vigoureuse dans le domaine liquide.

Puisqu'on a supposé le liquide interstitiel immobile, l'évolution de la température à l'intérieur du mush satisfait l'équation de diffusion de la chaleur,

$$\overline{\rho c_p} \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\bar{k} \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \rho_s L \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad (3.13)$$

où ϕ est la fraction solide et

$$\overline{\rho c_p} = \rho^s c_p^s \phi + \rho^\ell c_p^\ell (1 - \phi) \quad \text{et} \quad \bar{k} = k^s \phi + k^\ell (1 - \phi). \quad (3.14)$$

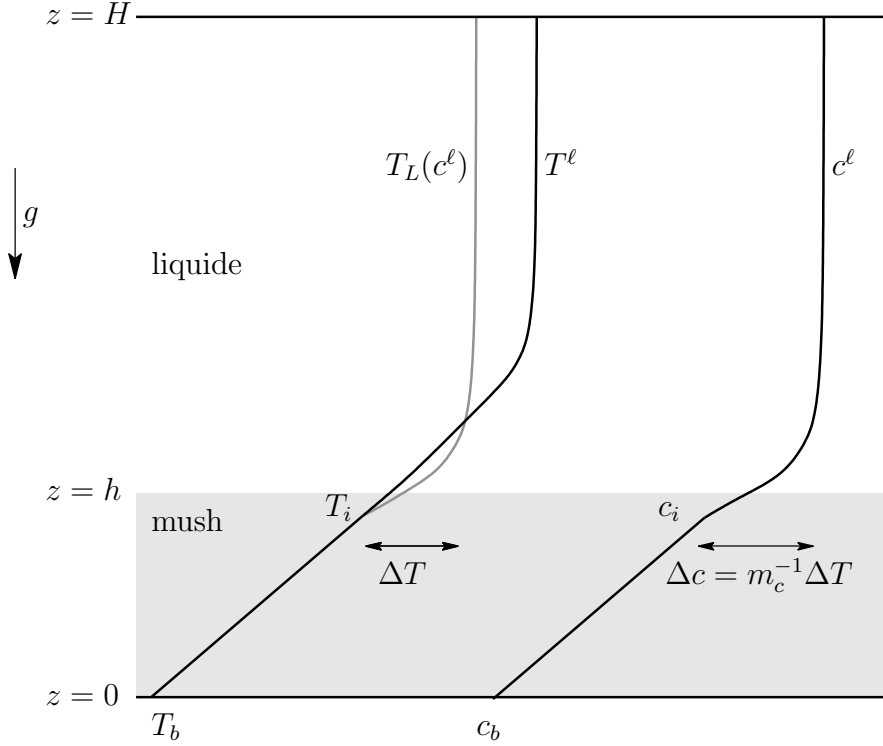


Figure 3.8 – Une vue schématique du modèle de cristallisation. Une zone dendritique est cristallisée en refroidissant à sa base un liquide à la concentration c^ℓ et à la température T^ℓ . La température et la concentration valent T_b et c_b à la base du récipient, et T_i et c_i au niveau de l'interface mush/liquide.

Pour simplifier, on supposera les propriétés des deux phases identiques, ce qui permet de réécrire cette équation sous la forme

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \frac{L}{c_p} \frac{\partial \phi}{\partial t}. \quad (3.15)$$

Cette simplification est en partie justifiée par le fait que la fraction solide est faible dans les expériences utilisant du chlorure d'ammonium (souvent autour de 5 %). Les propriétés de la zone de mush sont donc proches de celles de la phase liquide.

Si on néglige la diffusion du soluté, la concentration dans le mush est liée à la fraction solide par la loi de distillation de Rayleigh,

$$(1 - \phi) \frac{\partial c}{\partial t} = c \frac{\partial \phi}{\partial t}, \quad (3.16)$$

où on a supposé que le soluté fractionne totalement entre le liquide et le solide ($k = 0$). En intégrant l'équation précédente, on obtient

$$\phi = \frac{\bar{c} - c}{1 - c} \quad (3.17)$$

où c est la concentration dans la phase liquide et $\bar{c} = c^s \phi + c(1 - \phi) = \phi + c(1 - \phi)$ est la concentration moyenne dans le mush en z . A l'intérieur de la zone dendritique, le

système est supposé être à l'équilibre thermodynamique. Température et concentration sont alors couplées par la relation du liquidus, $T = T_s(c_0) + m_c(c - c_0)$, ce qui permet de réécrire l'équation de conservation de la chaleur sous la forme

$$\left\{ 1 + \frac{L}{c_p} \frac{1 - \bar{c}}{m_c(1 - c_0)^2} \left[1 - \frac{T - T_s(c_0)}{m_c(1 - c_0)} \right]^{-2} \right\} \frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}. \quad (3.18)$$

Prendre en compte la chaleur latente libérée par la cristallisation dans le mush équivaut à considérer une capacité calorifique efficace dépendant de la température et supérieure à c_p .

La température est imposée à la base du récipient,

$$T(z = 0) = T_b \quad (3.19)$$

et vaut T_i au niveau de l'interface mush/liquide. T_i est une inconnue qui devra être déterminée au cours de l'évolution du mush. On suppose que la vitesse d'avancée du front est régie par une loi cinétique telle qu'observée par Worster & Kerr (1994), de la forme

$$\dot{h} = \mathcal{G}[T_s(c) - T_i]^2, \quad (3.20)$$

où $T_s(c)$ est la température de solidification à la concentration du domaine liquide, supposé bien mélangé et homogène.

Au niveau du front de solidification, la conservation de la chaleur donne la condition de Stefan

$$\rho \left[c_p(T^\ell - T_i) + L\phi_i \right] \dot{h} = k \left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{h^-} - F_T \quad (3.21)$$

où F_T est le flux de chaleur entre l'interface et le domaine liquide. Le premier terme du membre de gauche correspond à la chaleur libérée par le refroidissement du voisinage de l'interface lors de l'avancée du front. La condition de conservation du soluté donne une seconde condition au niveau de l'interface,

$$(c^\ell - \bar{c})\dot{h} = -F_c \quad (3.22)$$

où c^ℓ est la concentration dans le domaine liquide, supposée homogène, et F_c est le flux de soluté entre l'interface et le domaine liquide, supposé dominé par le flux convectif.

On suppose que la convection générée par la couche limite est très super-critique et on utilisera une paramétrisation du flux de soluté de la forme $Nu \propto Ra^{1/3}$, ce qui donne

$$F_c = 2^{4/3} \lambda D \left(\frac{\beta g}{D\nu} \right)^{1/3} (c^\ell - c_i)^{4/3} \quad (3.23)$$

où λ est une constante sans dimension. $\lambda \simeq 0.1$ dans le cas de la convection thermique et dans des conditions de non glissement sur les parois horizontales. Dans un système double-diffusif comme celui étudié ici, le transfert doit être limité en partie par l'effet stabilisant de la couche limite thermique, ce qui suggérerait une valeur de λ plus faible. En revanche, l'interface dendritique supposée ici présente une surface effective plus grande qu'une interface plane, ce qui peut faciliter le transport de soluté et peut suggérer une

valeur de λ plus grande (Worster & Kerr, 1994). Dans la suite λ sera pris comme un paramètre libre.

Le flux de chaleur F_T entre l'interface et le domaine liquide est la somme d'une contribution diffusive et du transport de chaleur par la convection double-diffusive. Ce transport est sans doute assez faible si la convection prend la forme de 'doigts de sel' laminaires mais peut être important si la convection devient turbulente (Woods & Huppert, 1989). Des arguments dimensionnels (Woods & Huppert, 1989) suggèrent que, dans le cas présent, un flux de chaleur de la forme

$$F_T = A\rho c_p \frac{T^\ell - T_i}{c^\ell - c_i} F_c, \quad (3.24)$$

pourrait être approprié. A est une constante sans dimension de l'ordre de 1 que l'on traitera comme un paramètre ajustable.

Enfin, la température et la concentration du domaine liquide évoluent en réponse aux flux de chaleur et de soluté. Des bilans de chaleur et de soluté sur le domaine liquide permettent d'écrire

$$\rho c_p (H - h) \dot{T}^\ell = -F_T, \quad (3.25)$$

$$(H - h) \dot{c}^\ell = -F_c, \quad (3.26)$$

où \dot{T}^ℓ et \dot{c}^ℓ sont les taux de variation de la température et de la concentration dans le domaine liquide.

On adimensionne maintenant le système en mettant à l'échelle les longueur par H et le temps par un temps diffusif $\tau_\kappa = H^2/\kappa$. On introduit la température adimensionnée

$$\theta = \frac{T - T_s(c_0)}{T_s(c_0) - T_b} = \frac{T - T_s(c_0)}{\Delta T} \quad (3.27)$$

et la concentration adimensionnée

$$\chi = \frac{c - c_0}{c_0 - c_b} = \frac{c - c_0}{m_c^{-1} \Delta T} \quad (3.28)$$

où la concentration c_b à la base du récipient est donnée par le liquidus, $c_b = c_0 + m_c^{-1}(T_b - T_s(c_0))$. Avec cet adimensionnement, la température de solidification θ_L est égale à χ . En particulier, la zone dendritique étant supposée être à l'équilibre thermodynamique, θ et χ sont égaux en tout point à l'intérieur de la zone de mush.

L'équation de la chaleur s'écrit pour les variables adimensionnées

$$\left[1 + \frac{S}{\mathcal{C}} \frac{1 - \bar{\chi}/\mathcal{C}}{(1 - \theta/\mathcal{C})^2} \right] \frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2} \quad (3.29)$$

où $\bar{\chi} = (\bar{c} - c_0)/(m_c^{-1} \Delta T) = \mathcal{C}\phi + (1 - \phi)\chi$. On a introduit le nombre de Stefan S et le rapport de concentrations \mathcal{C} définis comme

$$S = \frac{L}{c_p \Delta T} \quad \text{et} \quad \mathcal{C} = \frac{c^s - c_0}{c_0 - c_b} = \frac{1 - c_0}{c_0 - c_b}. \quad (3.30)$$

où $c^s = 1$ est la concentration de la phase solide. Le nombre de Stefan compare la chaleur latente libérée par la cristallisation à la chaleur spécifique libérée par le refroidissement,

et est de l'ordre de 7 dans nos expériences. Le nombre \mathcal{C} compare le contraste de concentration entre les phases solide et liquide aux variations de concentration dans la phase liquide. Ce nombre détermine la quantité de solide qui peut être formée à partir de la solution, pour une température froide T_b imposée, à laquelle correspond une concentration minimale c_b . La fraction de solide cristallisé est maximale si, à la fin de l'expérience, la concentration de la phase liquide est homogène et égale à c_b , qui est la concentration minimale permmissible. Dans ces conditions, la fraction solide est, par conservation de la masse, égale à

$$\phi = \frac{c_0 - c_b}{c^s - c_b} < \frac{c_0 - c_b}{c^s - c_0} = \mathcal{C}^{-1}. \quad (3.31)$$

$\mathcal{C} \simeq 27$ dans nos expériences, et la fraction de solide formé au cours de l'expérience sera donc faible, au maximum $\mathcal{C}^{-1} \simeq 4$ wt.%. Ce nombre est de première importance pour la structure de la zone de mush puisqu'il y détermine en grande partie la fraction solide. Si aucun échange de soluté ne se fait entre la zone de mush et le liquide, la fraction solide dans la zone dendritique est inférieure à \mathcal{C}^{-1} .

Dans l'équation de diffusion de la chaleur, θ et $\bar{\chi}$ sont tous deux petits devant \mathcal{C} , ce qui permet de s'affranchir de la non-linéarité introduite par l'évolution temporelle de la fraction solide, et d'écrire

$$\left(1 + \frac{S}{\mathcal{C}}\right) \frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2}. \quad (3.32)$$

L'effet du changement de phase sur l'évolution thermique de la zone de mush se limite en pratique à induire une capacité calorifique effective légèrement supérieure (de l'ordre de 25 % pour nos expériences). Cette simplification n'aurait pas pu être effectuée si le nombre \mathcal{C} était petit et la fraction solide dans la zone dendritique importante.

En $z = 0$, on a $\theta = \theta_b = -1$ et $\theta = \theta_i$ en h . Au niveau de l'interface, la loi de croissance relie la vitesse d'avancée de l'interface à la surfusion par

$$\dot{h} = \mu(\chi^\ell - \theta_i)^2 \quad \text{avec} \quad \mu = \mathcal{G} \frac{H \Delta T^2}{\kappa}, \quad (3.33)$$

où χ^ℓ représente ici la température de solidification à la concentration de la phase liquide, qui est aussi égale à la concentration de la phase liquide avec l'adimensionnement choisi ici.

La conservation du soluté à l'interface mush/liquide s'écrit

$$(\chi^\ell - \bar{\chi})\dot{h} = [\chi^\ell - \chi_i + (\chi_i - \mathcal{C})\phi_i]\dot{h} = -Nu_\chi(\chi^\ell - \chi_i)^{4/3} \quad (3.34)$$

où le nombre de Nusselt compositionnel est défini comme

$$Nu_\chi = 2^{4/3} \lambda H \frac{D}{\kappa} \left(\frac{\beta g}{D\nu} \right)^{1/3} (m_c^{-1} \Delta T)^{1/3}. \quad (3.35)$$

La condition de Stefan s'écrit

$$\left[S\phi_i + (\theta^\ell - \theta_i) \right] \dot{h} = \left. \frac{\partial \theta}{\partial z} \right|_{h-} - Nu^* (\theta^\ell - \theta_i)(\chi^\ell - \chi_i)^{1/3} \quad (3.36)$$

où on a défini un nombre de Nusselt thermique,

$$Nu^* = A 2^{4/3} \lambda H \frac{D}{\kappa} \left(\frac{\beta g}{D\nu} \right)^{1/3} (m_c^{-1} \Delta T)^{1/3} = A Nu_\chi, \quad (3.37)$$

qui quantifie le transport de chaleur par la convection double-diffusive.

Enfin, la conservation de la chaleur dans le domaine liquide s'écrit

$$(1 - h) \dot{\theta}^\ell = -Nu^* (\theta^\ell - \theta_i) (\chi^\ell - \chi_i)^{1/3} \quad (3.38)$$

et la conservation du soluté

$$(1 - h) \dot{\chi}^\ell = -Nu_\chi (\chi^\ell - \chi_i)^{4/3}. \quad (3.39)$$

Worster & Kerr (1994) résolvent numériquement le système complet formé des équations de conservation à l'interface, de l'équation de diffusion de la chaleur dans la zone de mush, et des équations d'évolution de la température et de la composition du domaine liquide. On peut cependant simplifier considérablement le système en supposant le champ de température quasi-stationnaire dans la zone de mush, ce qui implique un profil de température linéaire

$$\theta = \frac{1 + \theta_i}{h} z - 1. \quad (3.40)$$

L'approximation est bonne au début de l'expérience, où la zone dendritique est encore peu épaisse et le transport diffusif efficace. Le profil de température dans la zone dendritique étant supposé, le flux de chaleur diffusif au niveau de l'interface vaut

$$\left. \frac{\partial \theta}{\partial z} \right|_{h-} = \frac{1 + \theta_i}{h} \quad (3.41)$$

et la condition de Stefan s'écrit,

$$\left[S\phi_i + (\theta^\ell - \theta_i) \right] \mu (\chi^\ell - \theta_i)^2 = \frac{1 + \theta_i}{h} - A Nu_\chi (\theta^\ell - \theta_i) (\chi^\ell - \chi_i)^{1/3} \quad (3.42)$$

où on a de plus utilisé la relation cinétique $\dot{h} = \mu (\chi^\ell - \theta_i)^2$. L'évolution de la zone dendritique et du domaine liquide est alors déterminée par un système en θ_i , ϕ_i , θ^ℓ et χ^ℓ formé par les équations de conservation de la chaleur et du soluté à l'interface (équations (3.42) et (3.34)) et les équations de bilan de chaleur et de soluté dans le domaine liquide (équations (3.38) et (3.39)). L'hypothèse de quasi-stationarité du profil de température permet de s'affranchir de la résolution supplémentaire de l'équation de diffusion de la chaleur et rend la résolution numérique du système presque immédiate.

3.5.4 Résultats

La figure 3.9 compare l'évolution de l'épaisseur adimensionnée de la zone dendritique en fonction du temps pour une expérience réalisée sous gravité ambiante (losanges oranges) et l'expérience réalisée à 200 g (cercles verts). Les deux expériences ont été réalisées avec des paramètres sans dimension de valeurs similaires, mis à part le nombre

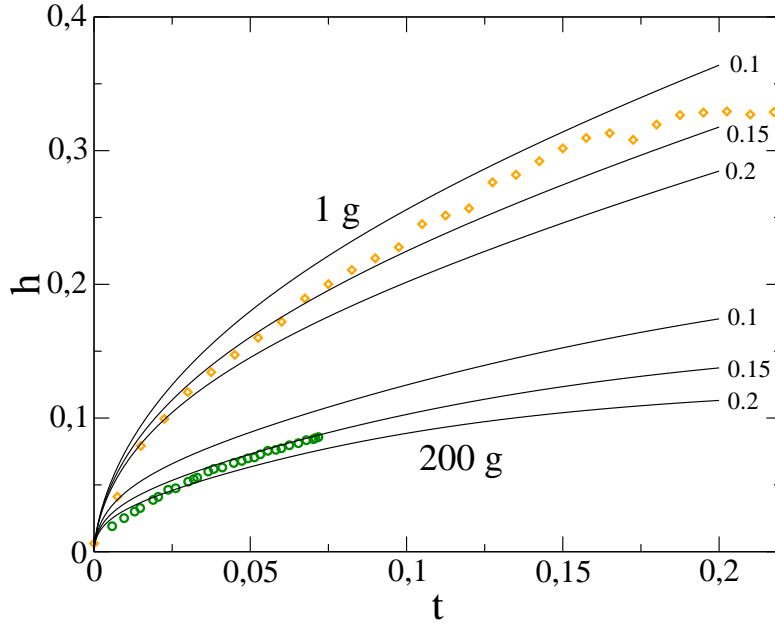


Figure 3.9 – Évolution de l'épaisseur h de la zone dendritique en fonction du temps t , adimensionnés par H et H^2/κ respectivement. Les données expérimentales, sous gravité ambiante (losanges oranges) et sous forte gravité (200 g , correspondant à une vitesse de rotation $\Omega = 1000$ rpm; cercles verts), sont comparées avec les prédictions du modèle pour $A = 1$ et $\lambda = 0.1, 0.15$ et 0.2 .

de Nusselt Nu_χ , plus grand dans l'expérience en rotation en raison de la plus forte gravité apparente (cf. table 3.1). La croissance de la zone dendritique est considérablement ralentie lors de l'expérience sous forte gravité par rapport à l'expérience sous gravité ambiante. Les mesures expérimentales sont comparées avec les résultats du modèle pour $A = 1$ et $\lambda = 0.1, 0.15$ et 0.2 . (A et λ , introduits dans les équations (3.24) et (3.23), quantifient l'importance des flux convectifs de chaleur et de soluté). L'accord est bon avec ce jeu de paramètres; en particulier le modèle reproduit l'observation que la croissance de la zone dendritique est significativement ralentie sous forte gravité. La raison, dans le modèle au moins, en est l'augmentation du flux de chaleur et de soluté entre l'interface et le domaine liquide. L'effet du flux de chaleur est direct : la condition de Stefan montre que l'avancée du front est contrôlée par la différence de flux de chaleur au travers de l'interface. L'augmentation du flux de chaleur en provenance du domaine liquide freine donc directement l'avancée de l'interface. L'augmentation du flux de soluté a un effet indirect sur la vitesse du front : l'apport de liquide riche en chlorure d'ammonium induit une augmentation de la fraction solide précipitée à l'interface. Cela implique une plus grande quantité de chaleur latente libérée par la cristallisation, qui doit être évacuée par conduction à travers la zone dendritique pour permettre la progression du front. L'effet des flux de chaleur et de soluté sur la vitesse de croissance est aussi apparent lorsque l'on fait varier λ : les flux sont augmentés, et la vitesse de cristallisation diminuée, lorsque λ augmente. Le modèle semble expliquer au mieux les données avec $\lambda = 0.15$.

L'accord avec les données expérimentales est bon pour $A = 1$ et λ de l'ordre de 0.1, mais est fortement fonction de la valeur de A . L'effet du paramètre A , qui lie le flux de chaleur au flux de soluté, peut être important comme le montre la figure 3.10.

S	7
\mathcal{C}	27
μ	30
Nu_χ	~ 6 à 0 rpm pour $\lambda = 0.15$
	~ 30 à 1000 rpm pour $\lambda = 0.15$

Table 3.1 – Valeurs des paramètres sans dimension des deux expériences de cristallisation, sous gravité ambiante et sous 200 g .

Si A est petit ($A = 0.1$ sur la figure), le flux de chaleur en provenance du domaine liquide est faible et la croissance de la zone dendritique est plus rapide. Si A est grand ($A = 10$ sur la figure), la croissance de la zone de mush est considérablement ralentie initialement mais accélère ensuite jusqu'à être plus rapide que dans le cas d'un flux faible. Ce comportement est une conséquence de l'évolution thermique du domaine liquide. Si le flux de chaleur est important, le taux de refroidissement du liquide est grand et l'excès de chaleur du liquide est rapidement évacué jusqu'à ce que la température θ^ℓ du liquide approche la température θ_i de l'interface, qui évoluent ensuite parallèlement. À ce stade, le flux de chaleur devient très faible, la cristallisation est facilitée et la croissance de la zone dendritique rapide.

La figure 3.11 montre l'effet de la gravité sur la fraction solide moyenne de la zone dendritique et sur la fraction solide de l'interface. Comme anticipé au paragraphe précédent, la fraction solide est très faible, de l'ordre de \mathcal{C}^{-1} , sous gravité ambiante. L'effet de la gravité est apparent : la fraction solide moyenne prédite par le modèle augmente considérablement avec la gravité imposée. Comme expliqué ci-dessus, cette augmentation est une conséquence directe de l'amplification du flux compositionnel. Le liquide riche en chlorure d'ammonium apporté par la convection devient saturé en approchant l'interface de solidification et se dépose au sommet de la zone dendritique, y augmentant ainsi la fraction solide. Un point étonnant, noté par Worster & Kerr (1994) et apparent sur la figure 3.11, est que la fraction solide de l'interface augmente plus vite que la fraction moyenne lorsque Nu_χ (ou g) est grand, jusqu'à devenir plus grande que la fraction moyenne. La zone dendritique pourrait alors présenter un 'couvrele' de faible perméabilité qui pourrait contribuer à empêcher le développement de convection en volume.

Jusqu'ici, le modèle rend bien compte des observations expérimentales, même si celles-ci sont insuffisamment nombreuses pour le valider. Le taux de croissance est bien expliqué avec des valeurs de A et de λ raisonnables et la différence de taux de croissance liée à la différence de gravité apparente est reproduite. Le modèle prédit aussi une plus forte fraction solide sous forte gravité, ce qui est en accord qualitatif avec l'expérience. L'hypothèse que la convection dans la zone de mush est retardée par une plus faible perméabilité résultant d'une forte fraction solide peut maintenant être testée à partir des résultats du modèle. Pour calculer le nombre de Rayleigh de la zone de mush,

$$R_m = \frac{\beta^* \Delta c \Pi_0 H g}{\nu \kappa},$$

il est nécessaire d'estimer la perméabilité moyenne Π_0 dans la zone de mush. On utilisera

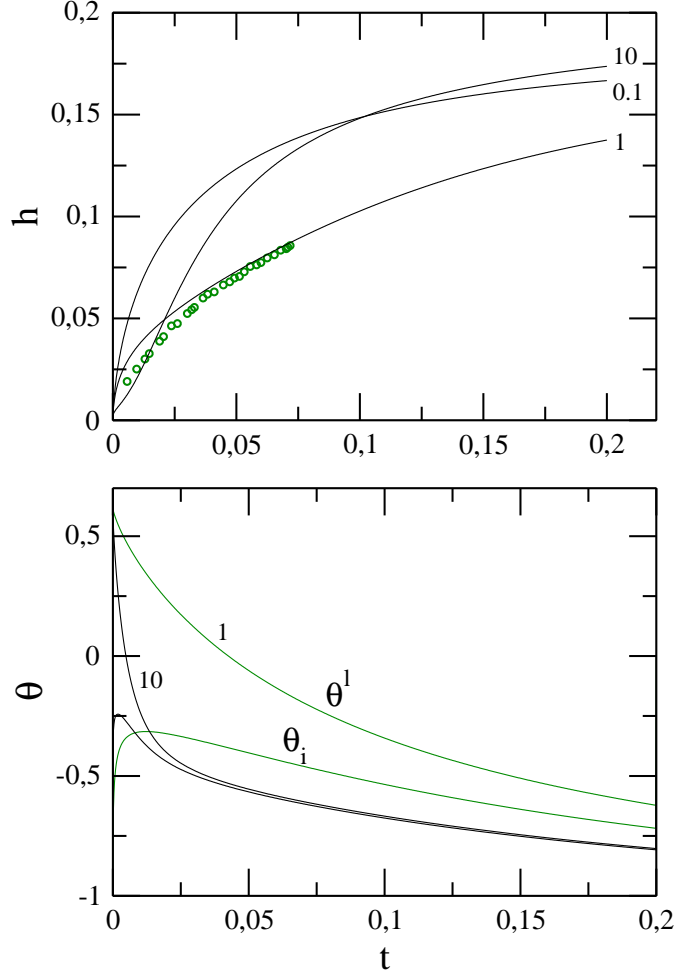


Figure 3.10 – Effet du paramètre A (introduit en (3.24)) sur la croissance de la zone dendritique et l'évolution thermique du domaine liquide, pour une gravité imposée de $200\,g$. En haut : évolution de h au cours du temps, pour $A = 0.1$, 1 et 10 , et $\lambda = 0.15$. En bas : évolution de la température θ^l du domaine liquide et θ_i de l'interface mush/liquide pour $A = 1$ (courbes vertes) et 10 (courbes noires), et $\lambda = 0.15$.

l'expression proposée par Tait & Jaupart (1992),

$$\Pi(\phi) = \frac{d^2}{8} [-2 \ln \phi - \phi^2 + 4\phi - 3], \quad (3.43)$$

obtenue en modélisant la zone dendritique comme une zone poreuse composée de cylindres solides, espacés d'une distance $2d$, et en supposant l'écoulement parallèle à ces cylindres. D'autres expressions pour la perméabilité existent, mais celle-ci a été utilisée par Tait & Jaupart (1992) pour estimer la valeur critique de R_m et il est donc cohérent de l'utiliser pour estimer R_m . Pour une zone dendritique, la distance d correspond à la moitié de l'espacement interdendritique, et de l'ordre de $0.5\,\text{mm}$ pour l'expérience sous gravité ambiante. Lors de l'expérience sous $200\,g$, l'espacement interdendritique n'a pas pu être déterminé avec précision, mais était significativement plus petit, avec $d < 0.1\,\text{mm}$.

La figure 3.12 montre l'évolution conjointe de R_m et de l'épaisseur de la zone den-

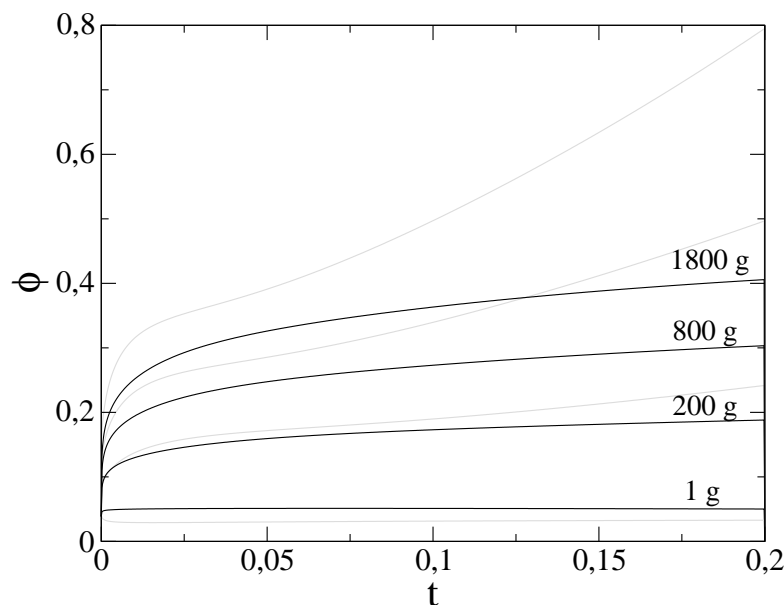


Figure 3.11 – Évolution de la fraction solide moyenne dans le mush (courbes noires) et de la fraction solide à l'interface mush/liquide (courbe grise) en fonction du temps, pour une gravité égale à la gravité ambiante, et à 200, 800 et 1800 g , correspondant à des vitesses de rotation $\Omega = 1000$ rpm, 2000 rpm et 3000 rpm. Ces calculs ont été effectués avec $\lambda = 0.15$ et $A = 1$.

dritique dans le cas d'une cristallisation sous gravité ambiante (courbe grise) et à 200 g (courbes noires). Sous gravité ambiante, le nombre de Rayleigh dépasse rapidement sa valeur critique (de l'ordre de 25), et la zone dendritique doit rapidement entrer en convection, conformément aux observations expérimentales. Sous forte gravité, le nombre de Rayleigh présente un maximum puis diminue avec h en raison de l'augmentation de la fraction solide. Lorsque l'expérience sous 200 g a été interrompue, h était de l'ordre de 0.08, à peu près au niveau du maximum de R_m d'après le modèle. La valeur maximale de R_m dépend très fortement de l'espacement interdendritique, la perméabilité étant proportionnelle à d^2 . Pour un espacement interdendritique similaire à ce qu'on observe dans des expériences sous gravité ambiantes, $d \sim 0.5$ mm, la perméabilité est suffisamment forte pour que le nombre de Rayleigh soit très super-critique. R_m dépend plus fortement de g que la fraction solide et la perméabilité. Pour que la valeur maximale de R_m soit sous-critique, un espacement interdendritique inférieur à $2d = 0.05$ mm est nécessaire. Ce point pourra être testé dans de futures expériences.

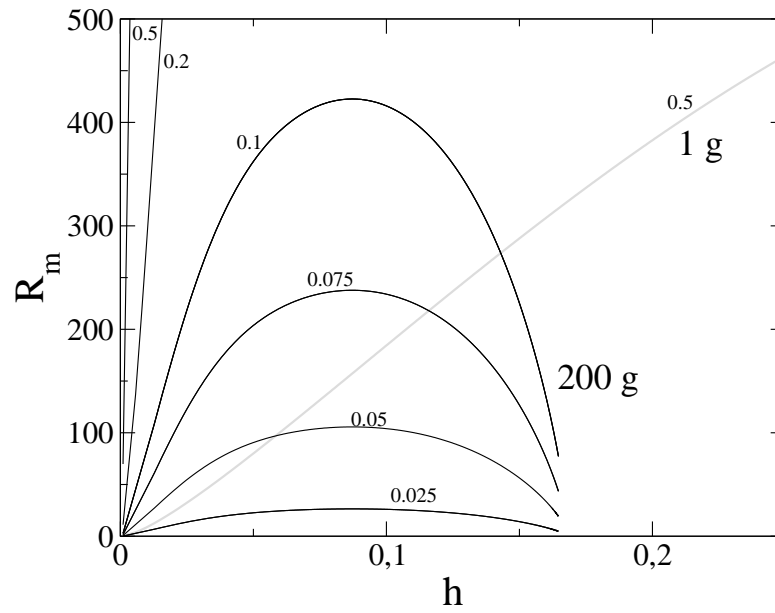


Figure 3.12 – Évolution conjointe du nombre de Rayleigh R_m de la zone de mush et de l'épaisseur de la zone de mush pour une cristallisation sous gravité ambiante et à 200 g . Le calcul de l'évolution de la zone de mush sous gravité ambiante a été effectué avec une demi distance interdendritique $d = 0.5$ mm. Pour simuler la cristallisation à 200 g , des calculs avec des valeurs de d (données par les annotations à côté des courbes) comprises entre 0.025 mm et 0.5 mm ont été effectués.

4 Déformation de la graine et anisotropie

On s'intéressera dans ce chapitre aux mécanismes de déformation de la graine à grande échelle. La stratification, thermique et chimique de la graine, est étudiée dans une première sous-partie et on précisera en particulier dans quelles conditions la graine est susceptible de convecter. On étudiera ensuite l'effet d'une stratification en densité stable sur le mécanisme proposé par Yoshida *et al.* (1996) pour expliquer l'origine de l'anisotropie de la graine. Dans une dernière sous-partie, on cherchera à comparer, de manière quantitative tant que possible, différents mécanismes de déformation proposés pour expliquer l'anisotropie de la graine.

4.1 État thermique et chimique de la graine

4.1.1 Le géotherme - la graine peut-elle convecter ?

La convection thermique de la graine a été le premier mécanisme proposé pour expliquer l'anisotropie élastique de la graine. La capacité de la graine à convecter dépend essentiellement du profil de température dans la graine, comparé à un profil adiabatique. Depuis les travaux de Jeanloz & Wenk (1988), le problème de la convection dans la graine a été explicitement lié à la question de la présence d'éléments radioactifs dans le noyau, et en particulier le ^{40}K . Comme discuté dans l'introduction la présence de potassium n'est pas requise par les modèles géochimiques de Terre, mais les incertitudes sur ces modèles et les expériences de fractionnement entre silicates et phase métallique autorisent une abondance de potassium de l'ordre de 100 à 200 ppm dans le noyau. Pour être présent de manière significative dans la graine, le potassium doit de plus avoir un coefficient de partage d'ordre 1 ou supérieur à 1.

Jeanloz & Wenk (1988) ont proposé que la chaleur radiogénique due à la présence de l'isotope radioactif ^{40}K pouvait fournir l'énergie nécessaire pour faire convecter la graine. La production de chaleur radiogénique n'est pourtant pas le terme dominant dans l'équation de diffusion de la chaleur,

$$\rho c_p \frac{dT}{dt} = k \nabla^2 T + h \quad (4.1)$$

où h est la production de chaleur par unité de volume d'alliage due à la désintégration du ^{40}K . La chaleur spécifique libérée par le refroidissement séculaire est de l'ordre de

$$\rho c_p \frac{d\bar{T}}{dt} \sim \left(\frac{\dot{T}}{100 \text{ K.Ga}^{-1}} \right) \times 2.5 \times 10^{-8} \text{ W.m}^{-3} \quad (4.2)$$

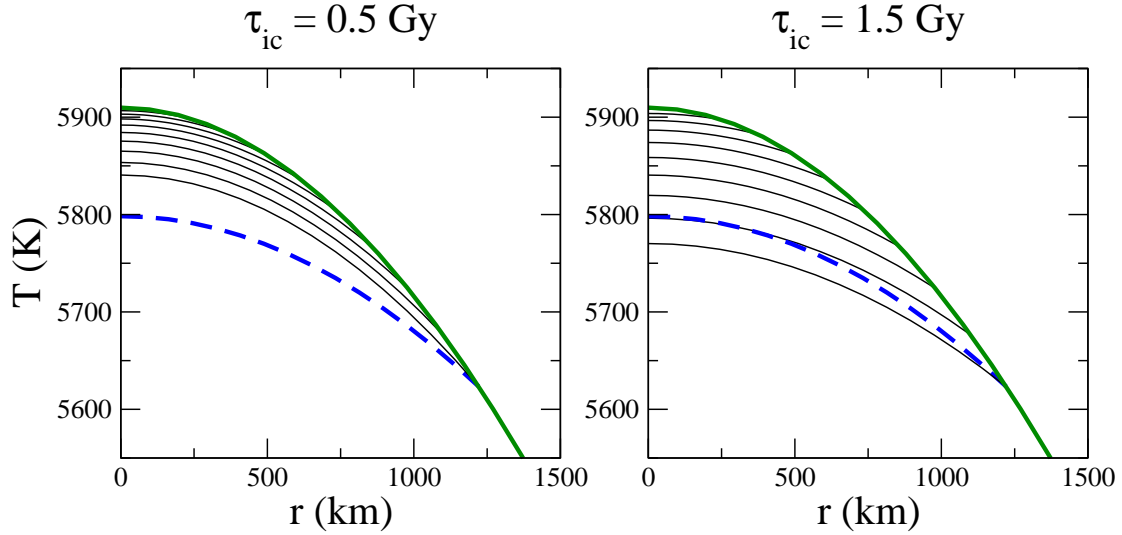


Figure 4.1 – Profils thermiques diffusifs dans la graine calculés pour deux taux de refroidissement différents, résultant en une graine âgée de 0.5 Ga et 1.5 Ga respectivement, pour $k = 60 \text{ W.m}^{-2}$, $c_p = 850 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$ et $\alpha = 1.1 \times 10^{-5} \text{ K}^{-1}$. Le profil de température de solidification est tracé en vert, et l’adiabat ancré sur la température actuelle de l’ICB en bleu tireté. Avec ce choix de paramètre les profils calculés sont super-adiabatiques dans le cas d’une graine jeune et sous-adiabatiques pour une graine vieille d’1.5 Ga. Le refroidissement de la graine est calculé numériquement en utilisant un schéma de type Crank-Nicholson, après avoir fait le changement de variable $\tilde{r} = r/r_{\text{ic}}(t)$ qui permet de transformer le problème à frontière mouvante en un problème à frontière fixe. La température à l’ICB est imposée à chaque pas de temps, en supposant une croissance en \sqrt{t} du rayon de la graine et une décroissance linéaire avec le temps de la température dans le noyau.

alors que la chaleur radiogénique due à la décomposition du ^{40}K est de l’ordre de

$$h \sim \left(\frac{[^{40}\text{K}]}{100 \text{ ppm}} \right) \times 4.5 \times 10^{-9} \text{ W.m}^{-3}. \quad (4.3)$$

La demi-vie du ^{40}K étant de $\sim 1.3 \text{ Ga}$, du même ordre de grandeur que l’âge de la graine, la production de chaleur radiogénique a évolué de manière appréciable au cours de l’histoire de la graine. La production moyenne de chaleur depuis la nucléation de la graine est

$$\bar{h} = \frac{1}{\tau_{\text{ic}}} \int_{-\tau_{\text{ic}}}^0 h e^{-\lambda t} dt = \frac{e^{\lambda \tau_{\text{ic}}} - 1}{\lambda \tau_{\text{ic}}} h_K \underset{\lambda \tau_{\text{ic}} \sim 1}{\sim} \left(e - \frac{1}{\lambda \tau_{\text{ic}}} \right) h. \quad (4.4)$$

Avec $\lambda = 0.55 \text{ Ga}^{-1}$ et un âge de la graine $\tau_{\text{ic}} = 1.5 \text{ Ga}$, $\bar{h} \sim 1.5 \times h$. L’importance relative de la production de chaleur radiogénique augmente avec l’âge de la graine, d’une part car la production de chaleur radiogénique était significativement plus grande dans le passé, mais aussi parce que le taux de refroidissement est inversement proportionnel à l’âge de la graine. La chaleur radiogénique apporte cependant une contribution relativement faible au bilan de chaleur de la graine, et le profil de température de la graine doit au premier ordre découler du transport diffusif de la chaleur primordiale.

Clairement, le paramètre le plus important pour l'état thermique de la graine est son âge. La figure 4.1 illustre bien ce point. Sur cette figure, ont été tracés les profils de température (traits fins noirs) successifs à différents temps pour deux âges supposés de la graine, 0.5 Ga et 1.5 Ga, calculés numériquement en supposant un transfert de chaleur uniquement conductif. Sur ce graphique, sont aussi représentés le profil de température de cristallisation, en vert, et le profil adiabatique actuel en bleu tireté. Le refroidissement de la graine se fait à travers l'ICB, où la température est imposée par l'évolution thermique du noyau. A l'intérieur de la graine, le refroidissement se fait, on le suppose ici, par conduction. Le profil de température résulte d'une compétition entre la chute de température à l'ICB et l'efficacité de la conduction thermique à évacuer la chaleur interne de la graine. Si la graine cristallise rapidement en comparaison avec le temps diffusif $\tau_\kappa = r_{ic}^2/6\kappa \sim 1.4 \pm 0.3$ Ga, la conduction seule n'a pas le temps d'évacuer la chaleur interne. La température reste élevée en profondeur, le géotherme est raide, et éventuellement super-adiabatique (figure 4.1.a). Dans ce cas, si le nombre de Rayleigh est supercritique, la graine peut convecter et le transport convectif de chaleur vient s'ajouter au transport conductif pour ramener le géotherme vers l'adiabat. Si au contraire la croissance de la graine est lente comparée au temps diffusif, la diffusion seule suffit à évacuer de manière efficace la chaleur interne de la graine, et le géotherme est sous-adiabatique (figure 4.1.b) : la graine est stable.

Le problème ici est que les valeurs des paramètres physiques importants sont pour la plupart entachées d'une grande incertitude. La figure 4.2 est une compilation de plusieurs calculs d'évolution thermique de la graine pour des jeux de paramètres différents, où l'on a représenté la limite entre stratification thermique sous-adiabatique et super-adiabatique, en fonction de l'âge supposé de la graine τ_{ic} et de son rayon $r_{ic}(t)$ à un temps donné. En prenant $c_p = 650 - 850$ J.kg⁻¹ (Stacey, 1992; Vočadlo, 2007), $k = 50 - 60$ W.m⁻¹.K⁻¹ (Stacey, 1992), $\alpha = 1.2 \pm 0.1 \times 10^{-5}$ K⁻¹ (Vočadlo, 2007), $\rho = 13000$ kg.m⁻³ (Dziewonski & Anderson, 1981), et le profil de température de solidification de Alfè *et al.* (1999) ($T \simeq 5500$ K, $m_p = \partial T_s / \partial P \simeq 8.5 \times 10^{-9}$ K.Pa⁻¹), l'incertitude sur les divers paramètres physiques se propage directement sur la limite super-adiabatique/sous-adiabatique, et on obtient un âge limite de la graine compris entre essentiellement 0 Ga et près d'1 Ga. Pour comparaison, Labrosse *et al.* (2001) estiment que l'âge de la graine est probablement compris entre 0.5 Ga et 1.5 Ga si l'abondance de ⁴⁰K est faible dans le noyau ; Nimmo (2007), à partir d'une comparaison de travaux de différents groupes, estime un âge de la graine compris entre 0.37 Ga et 1.90 Ga.

Pour comprendre et quantifier l'effet des divers paramètres, il est utile, et intéressant, d'estimer analytiquement l'âge critique correspondant à la limite super-adiabatique/sous-adiabatique. Si on suppose que le rayon de la graine grandit en \sqrt{t} , on peut trouver une solution analytique de l'équation de diffusion de la chaleur (*cf.* article Deguen & Cardin (2009) présenté en annexes, pages 162-164), qui prédit un profil de température de la forme

$$T(r) = \frac{\dot{T}_s}{1 + \tau_\kappa/\tau_{ic}} \left(\frac{r^2}{6\kappa} + t \right) + T_s(0), \quad (4.5)$$

où

$$\dot{T}_s = -\frac{1}{2} m_P \rho g' \frac{r_{ic}^{*2}}{\tau_{ic}} \quad (4.6)$$

est le taux de variation de la température de solidification T_s à l'ICB, T_s décroissant linéairement avec le temps lorsque $r_{ic} \propto \sqrt{t}$. $T_s(0)$ est la température de solidification

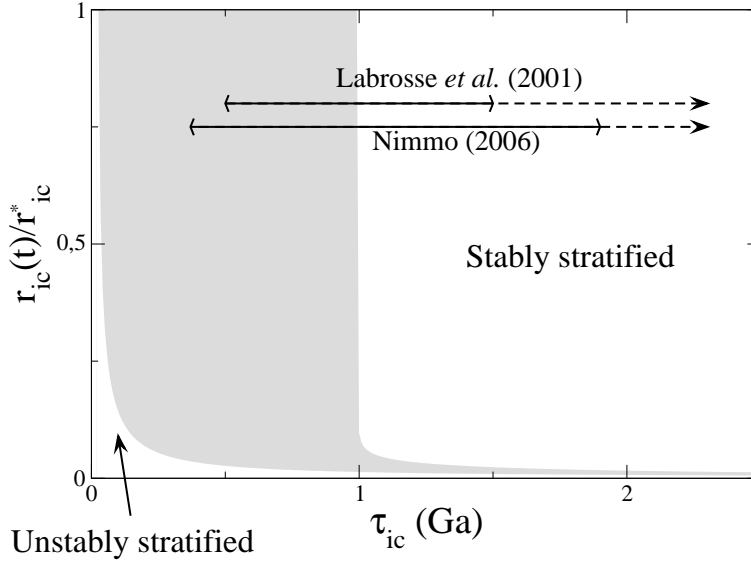


Figure 4.2 – Diagramme de stabilité thermique de la graine, en fonction de l’âge de la graine (τ_{ic}) et de son rayon $r_{ic}(t)$ au cours de son histoire, normalisé par le rayon actuel de la graine. La zone grisée sépare le domaine ($\tau_{ic}, r_{ic}(t)$) où le géotherme dans la graine est sous-adiabatique (pour τ_{ic} grand) du domaine où le géotherme est super-adiabatique. L’épaisseur de cette limite montre l’incertitude correspondant au jeu de paramètres cités dans le texte. L’âge critique en-dessous duquel la graine est susceptible de convecter varie entre essentiellement 0 Ga et 1 Ga. Les estimations de l’âge de la graine par Labrosse *et al.* (2001) et Nimmo (2007) sont représentées pour comparaison.

au centre de la graine, et r_{ic}^* est le rayon actuel de la graine. Le gradient à un rayon r quelconque est alors donné par

$$\frac{\partial T}{\partial r} = -\frac{m_P \rho g'}{1 + \tau_{ic}/\tau_\kappa} r, \quad (4.7)$$

où $g' = dg/dr$, auquel il faut comparer le gradient adiabatique

$$\frac{\partial T_{ad}}{\partial r} = -\frac{\alpha g T}{c_p} = -\frac{\alpha g' T}{c_p} r. \quad (4.8)$$

Les variations de température à l’intérieur de la graine sont relativement petites, de l’ordre de 5 % au maximum, et si on les néglige dans l’expression du gradient adiabatique, celui-ci est linéaire en r , tout comme le gradient de température. Par conséquent, si le gradient thermique est sous-adiabatique en un point de la graine, il l’est dans toute la graine. En comparant les équations (4.7) et (4.8), il apparaît que le géotherme est sous-adiabatique si l’âge de la graine est supérieur à

$$\tau_{ic} > \tau_\kappa \left(\frac{dT_s}{dT_{ad}} - 1 \right) = \frac{r_{ic}^{*2}}{6\kappa} \left(\frac{m_P \rho c_p}{\alpha T} - 1 \right). \quad (4.9)$$

L’âge critique est, sans surprise, directement dépendant du temps de diffusion, mais dépend aussi de manière forte du rapport entre la pente de Clapeyron et celle de l’adiabat, qui est une mesure de la distance entre l’état initial ($\sim T_s$) et l’adiabat. En prenant

les mêmes paramètres que ceux utilisés pour tracer la figure 4.2, on obtient $\tau_\kappa = 1.4 \pm 0.3$ Ga, $dT_s/dT_{ad} \sim 1.06 - 1.6$, et un âge critique compris entre 60 Ma et ~ 1 Ga, un résultat en très bon accord avec les calculs numériques de la figure 4.2. L'hypothèse de taux de refroidissement constant nécessaire à l'obtention de la solution analytique présentée ici n'est pas vérifiée en général, mais le critère proposé ici prédit néanmoins de manière satisfaisante la limite entre stratification thermique sous-adiabatique et super-adiabatique pour une histoire thermique plus réaliste. La présence de convection thermique dans la graine est envisageable si la graine est jeune et si on tire les paramètres thermophysiques dans le bon sens (conductivité thermique faible, différence de pente importante entre le profil de température de solidification et l'adiabat, forte capacité calorifique). A partir de calculs numériques de l'évolution du géotherme dans la graine, Yukutake (1998) estime la convection dans la graine très peu probable, mais il n'a effectué des calculs que pour deux âges de la graine, 1.5 Ga et 4 Ga, et n'a pas quantifié l'effet des incertitudes sur les paramètres. L'idée que la convection de la graine est impossible est très répandue dans la communauté (*e.g.* Stacey, 1995; Yoshida *et al.*, 1996; Yukutake, 1998; Karato, 1999; Buffett & Bloxham, 2000), mais la présente étude suggère une conclusion plus nuancée. Il semble plus probable que la graine soit stratifiée thermiquement, mais l'incertitude sur les paramètres et l'âge relativement jeune qui semble émerger des études les plus récentes sur l'évolution thermique du noyau (*e.g.* Labrosse *et al.*, 2001; Gubbins *et al.*, 2003, 2004; Nimmo, 2007) rendent envisageable la convection thermique dans la graine.

En présence de chaleur radiogénique, il n'existe plus de solution analytique simple de l'équation de diffusion car la production de chaleur évolue avec le temps. On peut cependant proposer une solution approchée en supposant que cette variation n'est pas trop grande et que l'on peut assimiler la production constante, et égale à la production moyenne \bar{h} depuis la nucléation de la graine. On obtient alors le critère

$$\frac{\partial T}{\partial P} > \frac{\partial T_{ad}}{\partial P} \quad \Leftrightarrow \quad \tau_{ic} < \tau_\kappa \left(\frac{dT_s}{dT_{ad}} + \frac{\Delta T_h}{\Delta T_{ad}} - 1 \right) \quad (4.10)$$

où $\Delta T_h = r_{ic}^2 \bar{h} / (6k^s) \sim 20$ K pour 100 ppm de potassium et ΔT_{ad} la différence de température le long de l'adiabat entre le centre de la graine et l'ICB. ΔT_h dépend de τ_{ic} et l'âge critique doit donc être calculé numériquement. L'ordre de grandeur du terme $\Delta T_h / \Delta T_{ad}$ est

$$\frac{\Delta T_h}{\Delta T_{ad}} = \frac{c_p \bar{h}}{3\alpha g' T k^s} \sim \left(e - \frac{1}{\lambda \tau_{ic}} \right) \left(\frac{[^{40}\text{K}]}{100 \text{ ppm}} \right) \times 0.1. \quad (4.11)$$

L'effet est de second ordre comparé à celui de l'âge de la graine. De plus, l'effet du potassium est à modérer par le fait qu'une abondance importante d'éléments radioactifs dans le noyau a aussi pour conséquence un taux de refroidissement séculaire plus faible et une graine plus vieille.

L'âge de la graine peut être estimé en intégrant le bilan énergétique du noyau (§2.3.1 équation (2.28)) en temps depuis la nucléation de la graine, pour obtenir

$$\bar{Q}_{\text{CMB}} \tau_{ic} = W_s + W_L + W_g + W_R, \quad (4.12)$$

où W_s , W_L et W_g représentent respectivement l'énergie libérée par le refroidissement séculaire du noyau, la chaleur latente libérée par la cristallisation de la graine, et l'énergie gravitationnelle associée à l'enrichissement en éléments légers du noyau. Dans cette

équation, W_s , W_L et W_g ne dépendent pas de l'âge de la graine, mais seulement des propriétés thermophysiques du noyau, et on écrit

$$\tau_{ic} = \frac{W_s + W_L + W_g}{\bar{Q}_{CMB}} + \frac{W_R}{\bar{Q}_{CMB}} = \tau_{ic}^0 + \frac{W_R}{\bar{Q}_{CMB}} \quad (4.13)$$

où τ_{ic}^0 est l'âge qu'aurait la graine en l'absence de source de chaleur radiogénique. Le terme de production de chaleur radiogénique dépend de τ_{ic} et peut s'écrire

$$W_R = V_c \int_{-\tau_{ic}}^0 h e^{-\lambda t} dt = V_c \frac{h}{\lambda} (e^{\lambda \tau_{ic}} - 1) = \frac{Q_R^0}{\lambda} (e^{\lambda \tau_{ic}} - 1), \quad (4.14)$$

où λ et h sont respectivement la constante de désintégration et la production actuelle volumique de chaleur radiogénique. Q_R^0 est la production actuelle de chaleur radiogénique intégrée sur tout le noyau. En présence de production de chaleur radiogénique, le bilan de chaleur n'admet plus de solution analytique pour τ_{ic} , mais on peut tout de même avoir une idée assez précise de la sensibilité de l'âge de la graine à la présence d'éléments radioactifs en développant l'exponentielle autour de $\lambda \tau_{ic}^0$. On obtient au premier ordre

$$\Delta \tau_{ic} = \tau_{ic} - \tau_{ic}^0 \simeq \frac{Q_R^0}{\lambda \bar{Q}_{cmb}} (e^{\lambda \tau_{ic}^0} - 1) \quad (4.15)$$

$$\simeq \left(\frac{10 \text{ TW}}{\bar{Q}_{cmb}} \right) \left(\frac{[^{40}\text{K}]}{100 \text{ ppm}} \right) \left(\frac{e^{\lambda \tau_{ic}^0} - 1}{e^{\lambda(1 \text{ Ga})} - 1} \right) \times 0.1 \text{ Ga} \quad (4.16)$$

La présence d'une source de chaleur supplémentaire a pour effet de ralentir la vitesse de refroidissement du noyau, et implique donc une graine plus vieille, toutes choses étant égales par ailleurs. L'effet est d'autant plus important que le flux de chaleur à la CMB est faible car d'une part la production de chaleur radiogénique prend une part relative plus importante dans le bilan de chaleur, et d'autre part parce que la production de chaleur radiogénique a été plus importante dans le passé.

On peut quantifier cet effet en comparant la différence d'âge critique τ_{ic}^c due à la production de chaleur radiogénique à la différence d'âge de la graine induite par la même production de chaleur. En différenciant par rapport à h les relations (4.10) et (4.13), et en formant le rapport de ces deux dérivées, on obtient

$$\frac{d\tau_{ic}^c}{d\tau_{ic}} = \frac{c_p}{4\pi\alpha g' k^s T r_c^3} \frac{\tau_{ic}}{\bar{Q}_{cmb}} \simeq \left(\frac{\bar{Q}_{cmb}}{10 \text{ TW}} \right) \frac{\tau_{ic}}{\tau_{ic}}. \quad (4.17)$$

Ce rapport est d'ordre 1 : l'effet de la production de chaleur radiogénique dans la graine sur le géotherme est compensé par le fait que cette source de chaleur additionnelle ralentit la croissance de la graine et laisse plus de temps à la diffusion pour évacuer la chaleur interne de la graine. D'après cette relation, la production de chaleur radiogénique dans le noyau peut même être défavorable à la présence de convection dans la graine si le flux de chaleur à la CMB est modeste et la graine pas trop jeune. La présence de potassium n'est donc clairement pas le paramètre le plus critique pour la convection dans la graine. Pour avoir un effet significatif, la concentration en éléments radioactifs doit non seulement être importante, mais en plus être plus élevée dans la graine que dans le noyau (il faudrait que le potassium soit compatible). Dans les silicates par exemple, les éléments radioactifs K, U et Th sont en général incompatibles en raison de leur encombrement important, et il est fort possible que leur rayon ionique rende difficile leur incorporation dans le fer solide.

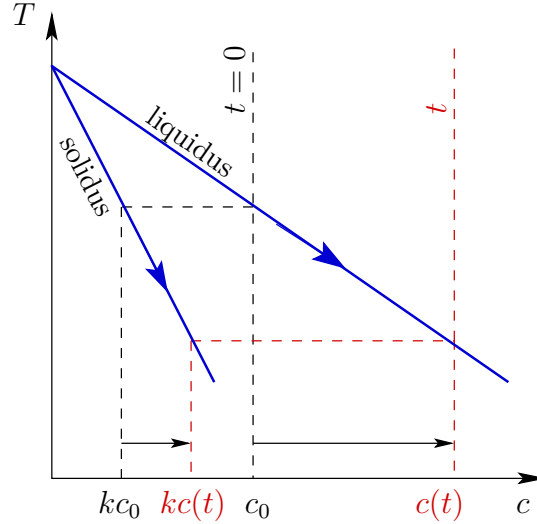


Figure 4.3 – Évolution chimique du noyau et de la graine. La composition de la graine suit le solidus du diagramme de phase et est progressivement enrichie en éléments légers en réponse à l'évolution chimique du noyau liquide.

4.1.2 Stratification chimique

La graine est probablement stratifiée chimiquement. La raison en est le fractionnement des éléments (légers en particulier) associé à la cristallisation de la graine. Les éléments légers sont préférentiellement incorporés dans le liquide lors de la cristallisation, et leur abondance dans le noyau augmente à mesure que la graine cristallise. Si l'on suppose que le coefficient de partage varie raisonnablement peu au cours de la cristallisation, l'enrichissement du noyau doit se refléter sur la composition de la graine et le solide nouvellement cristallisé doit être de plus en plus riche en éléments incompatibles (figure 4.3). En conséquence, la graine doit être plus riche en éléments légers à sa surface qu'en profondeur, et donc être stratifiée stablement.

L'évolution chimique du noyau peut être calculée en utilisant la loi de fractionnement de Rayleigh (*e.g.* Albarède, 1996), bien connue des géochimistes, qui donne la concentration c^ℓ dans le liquide d'un élément donné en fonction du rapport entre la masse de solide cristallisé et la masse initiale de liquide, $c^\ell(t) = c_0^\ell [1 - M_s(t)/M_0]^{k-1}$, c_0 étant la concentration initiale et k le coefficient de partage. Si on ignore l'effet de la compressibilité sur la densité dans la graine, $M_s(t)/M_0 \sim (r_{ic}(t)/r_c)^3$ et le profil de concentration dans la graine, $c(r) = kc^\ell(t)$ est donné par

$$c(r) = kc_0^\ell \left(1 - \left(\frac{r}{r_c} \right)^3 \right)^{k-1}. \quad (4.18)$$

La différence de densité intrinsèque entre le centre de la graine et l'ICB au temps t est alors

$$\Delta\rho_\chi = \beta\rho_0 kc_0^\ell \left[\left(1 - \left(\frac{r_{ic}}{r_c} \right)^3 \right)^{k-1} - 1 \right] \sim \beta\rho_0 c_0^\ell k(1-k) \left(\frac{r_{ic}}{r_c} \right)^3, \quad (4.19)$$

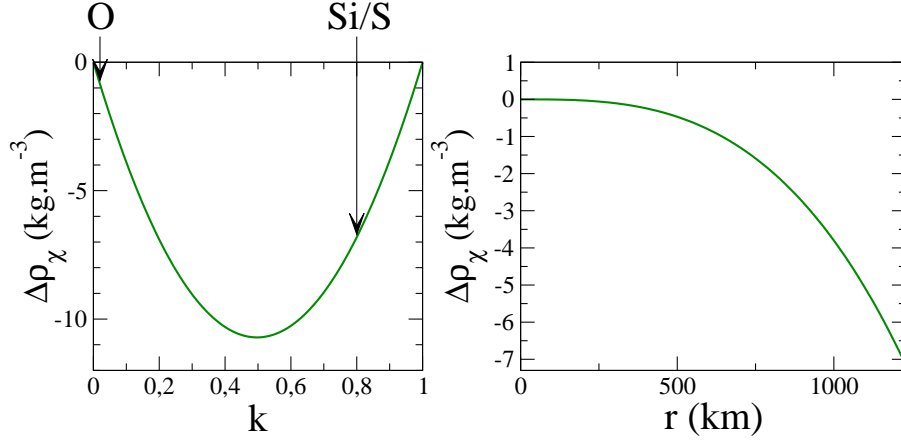


Figure 4.4 – A gauche : différence de densité induite par une stratification chimique entre le centre de la graine et l’ICB actuelle. A droite : écart de densité par rapport à la densité initiale en fonction de la distance au centre de la graine.

où $\beta = (1/\rho)(\partial\rho/\partial\chi)$ est le coefficient d’expansion chimique. La stratification chimique peut éventuellement être moins forte si le mélange dans le noyau n’est pas parfait et si le liquide riche en éléments légers tend à s’accumuler sous la CMB (Fearn & Loper, 1981; Braginsky, 2006)¹. L’évolution chimique du noyau peut aussi être différente si les transferts chimiques à travers la CMB entre le manteau et le noyau sont importants. Si ce transfert est suffisamment important pour que le noyau et le manteau soient proches de l’équilibre chimique (Buffett *et al.*, 2000), le manteau peut avoir un effet tampon sur la composition chimique du noyau et contrôler en partie l’évolution chimique du noyau (qui peut évoluer par exemple *via* une évolution avec la température des constantes d’équilibre chimique entre noyau et silicates). Un effet tampon similaire peut exister si la composition du noyau est proche de la limite de démixtion entre un liquide riche en fer et un autre riche en éléments légers, la composition de la phase riche en fer étant alors fixée par le diagramme de phase liquide-liquide. Enfin, la présence d’une couche riche en fer à la base du noyau, comme proposé dans la partie 2, pourrait découpler la composition à proximité de l’ICB de la composition moyenne dans le noyau. La présence et l’efficacité de ces mécanismes restant hypothétiques, on supposera ici que le noyau s’enrichit effectivement en éléments légers au cours de la croissance de la graine.

L’équation (4.19) montre que la différence de densité est maximale pour un coefficient de partage de l’ordre de 0.5, et tend vers 0 pour un coefficient de partage petit ou de l’ordre de 1 (voir figure 4.4). Avec les estimations *ab initio* d’Alfè *et al.* (2002b), l’élément qui induit la stratification en densité la plus importante est Si (ou S), dont le coefficient de partage est de l’ordre de 0.8, et la composition massique dans le noyau est estimée à 5.6 wt.% (convertie en pourcentage massique à partir des résultats en pourcentages molaires) par Alfè *et al.* (2002b). En supposant $\beta \sim -1$ (Gubbins *et al.*, 2004), on obtient une différence de densité due à la stratification chimique d’environ 5 kg.m^{-3} entre le centre de la graine et l’ICB actuelle.

Pour comparaison, l’écart à l’adiabat dans les profils de température de la figure 4.1 se traduit par une différence de densité entre l’ICB et le centre de l’ordre de $\alpha\rho\Delta(T-T_{ad})$,

¹Merci à Nicolas Gillet pour cette suggestion.

-6 kg.m^{-3} pour $\tau_{ic} = 0.5 \text{ Ga}$ et 4 kg.m^{-3} pour $\tau_{ic} = 1.5 \text{ Ga}$, soit sensiblement du même ordre que l'effet d'une stratification chimique. En conséquence, la stratification chimique peut compenser l'effet déstabilisateur d'un profil super-adiabatique, et considérablement renforcer la stratification dans le cas d'un profil sous-adiabatique.

L'effet est illustré sur la figure 4.5. Sur ce graphe, sont tracées les limites entre stratification en densité positive et négative, en prenant en compte la thermique et la chimie, pour un jeu raisonnable de paramètres thermophysiques. Les courbes noires continue et tireté représentent les limites entre profils super-adiabatique (pour τ_{ic} plus petit) et sous-adiabatique, sans ou avec chaleur radiogénique (100 ppm de potassium). Notez que l'effet de la présence de 100 ppm de potassium a un effet minime sur la stabilité thermique de la graine. Dans la région super-adiabatique, sont aussi tracés, pour chaque τ_{ic} supposé, le rayon de la graine (et de manière équivalente le temps t depuis la nucléation de la graine) auquel le nombre de Rayleigh de la graine devient supercritique, et ce pour deux valeurs de viscosité. Si la viscosité est forte ($\eta = 10^{20} \text{ Pa.s}$) l'initiation de la convection est tardive, et ce même pour une graine très jeune. Si la viscosité est plus faible ($\eta = 10^{16} \text{ Pa.s}$), la convection peut s'initier assez rapidement.

La courbe orange montre l'effet d'une stratification chimique sur cette limite. En-dessous de cette courbe, le profil de densité est instable ($d\rho/dr < 0$) malgré l'effet stabilisateur de la stratification chimique. Dans la région grisée au-dessus de cette courbe, le profil de densité est tel que $d\rho/dr > 0$, mais le profil de température est super-adiabatique, et donc déstabilisant. On peut y supposer la présence de convection double-diffusive de type oscillante (Turner, 1980). Si la graine est jeune, il est possible d'avoir eu un épisode convectif au début de l'histoire de la graine, aujourd'hui éteint par le renforcement graduel de la stratification chimique.

4.2 Déformation induite par une croissance hétérogène de la graine - effet d'une stratification stable

4.2.1 Avant-propos

L'étude de l'état thermique et chimique de la graine présentée ci-dessus montre qu'il est probable que la graine soit stratifiée en densité de manière stable. Ceci a bien sûr pour effet de rendre la convection thermique impossible, mais doit aussi de manière plus générale s'opposer à tout mouvement vertical dans la graine.

Supposons par exemple un écoulement axisymétrique stationnaire dans la graine, dont on note U et W les ordres de grandeur des vitesses horizontale et verticale respectivement. Cet écoulement peut être produit soit par les forces de Lorentz (Karato, 1999), soit par la relaxation continue d'une topographie induite par une croissance anisotrope de la graine, comme proposé par Yoshida *et al.* (1996). On suppose que l'échelle spatiale de l'écoulement est de l'ordre de r_{ic} . La graine est supposée stratifiée, avec un gradient de densité (corrigé des effets de compressibilité) égal à $d\rho_0/dr < 0$. On suppose le nombre de Reynolds très petit, une hypothèse plus que raisonnable au vu de la forte viscosité de la graine et des vitesses faibles attendues. L'écoulement obéit alors à l'équation de Stokes à laquelle on ajoute la force d'Archimède et la force de Lorentz $\mathbf{f}_L = \mu^{-1}(\nabla \times \mathbf{B}) \times \mathbf{B}$, couplée à la conservation de la masse

$$0 = -\nabla p + \rho' \mathbf{g} + \eta \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{f}_L \quad (4.20)$$

$$\mathbf{u} \cdot \nabla \rho = 0 \quad (4.21)$$

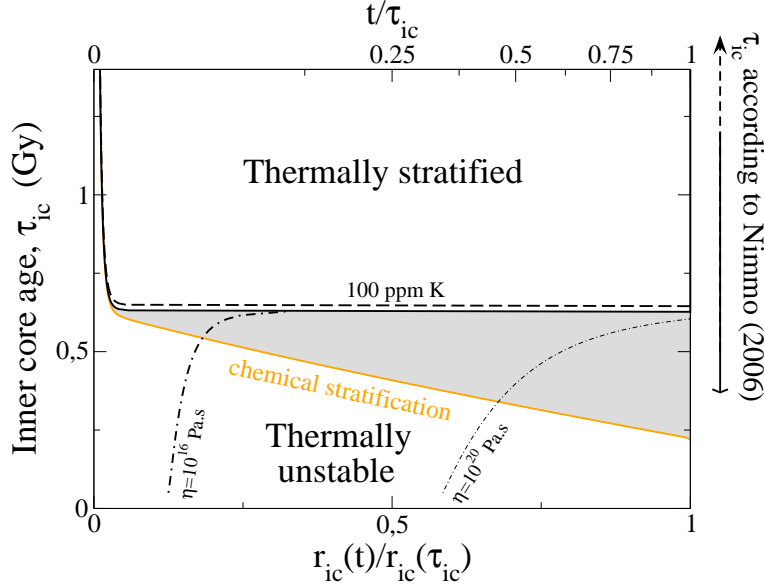


Figure 4.5 – Diagramme de stabilité de la graine, dans un espace $(\tau_{ic}, r_{ic}(t))$. Le géotherme dans la graine est sous-adiabatique au-dessus de la courbe noire continue, et super-adiabatique en-dessous. Cette limite est très légèrement translatée vers des âges plus élevé par l’ajout de 100 ppm de potassium dans la graine (ligne noire tiretée). Le domaine de stabilité est en revanche considérablement étendu par la présence de stratification chimique. La courbe orange indique la limite où l’effet déstabilisant du profil thermique est équilibré par l’effet stabilisant de la stratification chimique. Si l’âge de la graine est inférieur à ~ 0.6 Ga (pour ce jeu de paramètres), le profil est super-adiabatique, mais la graine ne peut convecquer que si son nombre de Rayleigh est supercritique. Le rayon de la graine à laquelle celle-ci est supercritique est indiqué pour deux viscosités, $\eta = 10^{16}$ Pa.s et $\eta = 10^{20}$ (lignes $- \cdot -$). La convection peut s’initier tôt dans l’histoire de la graine si sa viscosité est faible, mais est tardive et peu super-critique pour une viscosité forte. Dans le domaine instable thermiquement, la stratification chimique prend de l’importance à mesure que la graine grandit. Dans le domaine grisé, la stratification est statiquement stable ($d\rho/dr < 0$), mais le géotherme est superadiabatique et on peut supposer la présence de convection double-diffusive de type oscillante.

où on a noté p l’écart à la pression hydrostatique, $\rho'(r, \theta) = \rho(r, \theta) - \rho_0(r)$ l’écart au profil de densité moyen ρ_0 , η la viscosité dynamique et $\mathbf{u} = (u_r, u_\theta, 0)$ la vitesse. En terme de ρ' , l’équation de conservation de la masse s’écrit

$$u_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial \rho'}{\partial \theta} + u_r \left(\frac{\partial \rho'}{\partial r} + \frac{d\rho_0}{dr} \right) = 0. \quad (4.22)$$

Le premier terme est de l’ordre de $U\rho'/r_{ic}$ et le second terme de l’ordre de $W|d\rho_0/dr|$, ce qui permet d’écrire

$$\rho' \sim r_{ic} \frac{W}{U} \left| \frac{d\rho_0}{dr} \right|. \quad (4.23)$$

La variation de densité ρ' est de plus contrainte par le fait que la force d’Archimède induite par l’advection du champ de densité ne peut pas être plus grande que les forces qui mettent le fluide en mouvement et déforment les surfaces isodensité. La force de rappel

due à la déformation des surfaces isodensité est induite par des variations horizontales de densité. Pour cette raison, on réécrit l'équation de Stokes en terme de la fonction courant ψ , qui met ce point en évidence,

$$0 = \frac{1}{r} \frac{\partial \rho'}{\partial \theta} g + \eta \nabla^4 \left(\frac{1}{r \sin \theta} \psi \right) - \nabla \times \mathbf{f}_L; \quad u_r = \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial \psi}{\partial \theta}, \quad u_\theta = -\frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial \psi}{\partial r}.$$

Telle que définie, $\psi \sim r_{\text{ic}}^2 U$.

Dans le cas de l'écoulement proposé par Yoshida *et al.* (1996), la force de Lorentz est supposée nulle et la force d'Archimède ne doit pas être supérieure à la force visqueuse, ce qui implique que ρ' doit être au maximum de l'ordre de

$$\rho' \sim \frac{\eta}{g} \frac{r_{\text{ic}}}{r_{\text{ic}}^3} U. \quad (4.24)$$

En comparant (4.24) et (4.23), on obtient

$$\frac{W}{U} \sim \frac{\eta U}{g r_{\text{ic}}^3 \left| \frac{d\rho_0}{dr} \right|} \equiv \mathcal{B}^{-1}. \quad (4.25)$$

La stratification est forte et influe significativement sur l'écoulement si la vitesse verticale est contrainte d'être significativement plus petite que la vitesse horizontale, $W/U \ll 1$, c'est-à-dire quand le nombre \mathcal{B} (pour *buoyancy number*) est grand. Pour leur mécanisme, Yoshida *et al.* (1996) estiment des vitesses du même ordre de grandeur que la vitesse de cristallisation de la graine, $\sim 10^{-11} \text{ m.s}^{-1}$. En supposant une viscosité $\eta = 10^{16 \pm 4} \text{ Pa.s}$, et une stratification en densité de l'ordre de $d\rho_0/dr \sim (-5 \text{ kg.m}^{-3})/r_{\text{ic}} \sim 5 \times 10^{-6} \text{ kg.m}^{-4}$, on obtient $\mathcal{B} \sim 10^{8 \pm 4}$, ce qui suggère que la stratification doit significativement altérer l'écoulement.

Si l'écoulement est produit par la force de Lorentz (Karato, 1999), ρ' doit alors être au maximum de l'ordre de

$$\rho' \sim \frac{B^2}{\mu g r_{\text{ic}}} \quad (4.26)$$

où on a supposé que \mathbf{B} varie sur une échelle spatiale de l'ordre de r_{ic} . En comparant (4.26) à (4.23), on obtient

$$\frac{W}{U} \sim \frac{B^2}{\mu g r_{\text{ic}}^2 \left| \frac{d\rho_0}{dr} \right|} \quad (4.27)$$

Avec $B \sim 10^{-2}$ à 10^{-1} T , on obtient $W/U \sim 5 \times 10^{-5 \pm 1}$. Là encore, la stratification doit jouer un rôle important.

4.2.2 Le modèle de Yoshida *et al.* (1996)

Le modèle proposé par Yoshida *et al.* (1996) se base sur l'idée que la convection dans le noyau s'organise en colonnes géostrophiques bidimensionnelles sous l'influence de la force de Coriolis, et que cette bidimensionalisation implique un transfert de chaleur et d'éléments légers anisotrope dans le noyau. Yoshida *et al.* (1996) proposent que cette

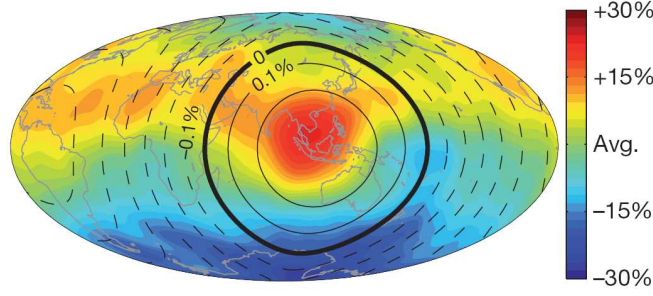


Figure 4.6 – Variations latérales du taux de cristallisation à la surface de la graine induite par la convection dans le noyau avec un flux de chaleur hétérogène à la CMB, d’après Aubert *et al.* (2008). La cristallisation est plus rapide au niveau de l’équateur qu’au niveau des pôles, et montre une asymétrie hémisphérique, l’hémisphère est présentant un taux de cristallisation supérieur à l’hémisphère ouest.

anisotropie du flux de chaleur induit un taux de cristallisation de la graine plus important au niveau de la ceinture équatoriale qu’au niveau des pôles. Yoshida *et al.* (1996) modélisent cette croissance anisotrope en écrivant l’anomalie de vitesse de cristallisation sous la forme d’un polynôme de Legendre de degré 2, et écrivent le taux de cristallisation $u(\theta, t)$ de la graine en fonction de la colatitute θ comme

$$u(\theta, t) = u_{ic}(t) [1 - S_2 P_2(\cos \theta)], \text{ où } P_2(\cos \theta) = \frac{1}{2} (3\cos^2 \theta - 1), \quad (4.28)$$

où S_2 est un paramètre décrivant l’amplitude de l’anisotropie de croissance. En terme de différence de taux de croissance entre l’équateur (u_{ic}^{eq}) et les pôles (u_{ic}^{poles}), cette expression implique

$$\frac{u_{ic}^{\text{eq}} - u_{ic}^{\text{poles}}}{u_{ic}} = \frac{3}{2} S_2. \quad (4.29)$$

Les résultats des simulations numériques de Aubert *et al.* (2008), où un flux de chaleur hétérogène à la CMB est imposé, montrent cette différence de taux de croissance entre la ceinture équatoriale et les pôles (figure 4.6). Leurs calculs suggèrent un taux de cristallisation $\sim 30\%$ plus fort que le taux moyen dans la région équatoriale et $\sim 30\%$ plus faible au niveau des pôles, ce qui se traduit par un paramètre S_2 de l’ordre de $2/5$. Le taux de cristallisation à l’équateur est environ le double du taux de cristallisation aux pôles.

La possibilité d’une croissance anisotrope de la graine dépend a priori des contributions relatives du flux de chaleur conduit le long de l’adiabat et du flux de chaleur convectif. À l’ICB, la conservation de la chaleur implique

$$\rho L \dot{r}_{ic}(\theta, \phi, t) = -q_{icb}^+ + q_{icb}^-, \quad (4.30)$$

$$= -q_{icb}^{\text{conv}}(\theta, \phi, t) - q_{icb}^{\text{ad}}(t) + q_{icb}^-(t), \quad (4.31)$$

où q_{icb}^- est le flux de chaleur dans la graine et q_{icb}^+ est le flux de chaleur à l’ICB côté noyau, qui est la somme du flux de chaleur conduit le long de l’adiabat et du flux de chaleur convectif. Ce bilan de chaleur fait apparaître que la seule source possible d’hétérogénéité

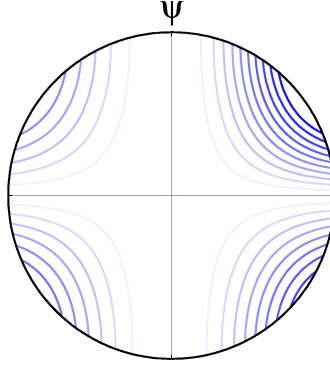


Figure 4.7 – Lignes de courant de l'écoulement induit par une croissance préférentielle de la graine à l'équateur, tel que calculé par Yoshida *et al.* (1996).

vient du flux convectif, et que le flux de chaleur conductif dans la graine tend à faciliter une croissance hétérogène, en compensant partiellement le flux adiabatique dans le noyau. On a supposé que le flux conductif dans la graine est à symétrie radiale, ce qui semble une bonne approximation puisque le temps caractéristique de diffusion de la chaleur dans la graine est relativement petit. Le degré d'hétérogénéité de la croissance de la graine dépend donc *a priori* du rapport du flux convectif sur la différence de flux conductif à l'ICB entre le côté liquide et le côté solide, que l'on notera ξ ,

$$\xi = \frac{q_{\text{icb}}^{\text{conv}}}{q_{\text{icb}}^{\text{ad}} - q_{\text{icb}}^-} \sim \frac{\rho L \dot{r}_{\text{ic}} + q_{\text{icb}}^{\text{ad}} - q_{\text{icb}}^-}{q_{\text{icb}}^- - q_{\text{icb}}^{\text{ad}}} \sim \frac{\rho L \dot{r}_{\text{ic}}}{q_{\text{icb}}^- - q_{\text{icb}}^{\text{ad}}} - 1. \quad (4.32)$$

En supposant une graine âgée de 1 Ga, $u_{\text{ic}} \simeq 2 \times 10^{-11}$, $\partial T / \partial r|_{\text{icb}-} = \Lambda m_p G_p \sim -2.4 \times 10^{-4} \text{ K.m}^{-1}$ (voir §2.3.2 page 39, equation (2.37), pour l'estimation du gradient thermique à l'ICB), un gradient adiabatique de l'ordre de $-3.7 \times 10^{-4} \text{ K.m}^{-1}$ (Shimizu *et al.*, 2005), et une conductivité thermique de 60 W.m^{-2} , on obtient un rapport ξ de l'ordre de 25. ξ dépend de l'âge de la graine via deux facteurs, qui conduisent tous deux à un nombre ξ d'autant plus grand que la graine est jeune : une croissance rapide implique un flux convectif important et un géotherme pentu dans la graine, impliquant q_{icb}^- relativement grand et par conséquent $q_{\text{icb}}^{\text{ad}} - q_{\text{icb}}^-$ petit. À l'inverse, une croissance lente de la graine implique un flux de chaleur faiblement super-adiabatique, et un géotherme peu pentu dans la graine, diminuant ainsi les écarts à la symétrie sphérique. Ce rapport ξ est assez incertain, puisqu'il dépend à la fois de l'histoire thermique du noyau et des propriétés physiques du fer (en particulier du gradient adiabatique), mais il semble malgré tout être relativement grand : la croissance de la graine est essentiellement contrôlée par le flux de chaleur convectif, et peut par conséquent présenter des variations géographiques potentiellement importantes.

En raison du saut de densité à l'ICB, la topographie résultant d'une croissance différentielle de la graine induit des contraintes non-hydrostatiques en volume qui nourrissent un écoulement solide de l'équateur vers les pôles. Le temps de relaxation d'une telle topographie est de l'ordre de

$$\tau_\eta \sim \frac{\eta}{\Delta \rho_{\text{icb}} g r_{\text{ic}}} \sim 0.3 \left(\frac{\eta}{10^{16} \text{ Pa.s}} \right) \text{ ans} \quad (4.33)$$

et est très petit devant l'âge de la graine. Par conséquent, la surface de la graine doit rapidement atteindre un régime quasi-stationnaire, où l'intégralité de la croissance anisotrope de la graine est accommodée par la déformation de la graine. La graine conserve sa figure d'équilibre, à une ellipticité résiduelle près que l'on peut estimer une fois l'écoulement connu à partir de la continuité de la contrainte normale à l'ICB. On peut par conséquent, comme l'on fait Yoshida *et al.* (1996), supposer que la vitesse radiale u_r à l'ICB imposée par cette relaxation continue de la topographie soit égale à l'opposée de l'anomalie de taux de croissance de la graine,

$$u_r(r_{\text{ic}}, \theta) = -u_{\text{ic}}(t)S_2P_2(\cos \theta). \quad (4.34)$$

Yoshida *et al.* (1996) ont calculé analytiquement l'écoulement résultant en résolvant l'équation de Stokes pour un fluide incompressible,

$$0 = -\nabla p + \eta \nabla^2 \mathbf{u}, \quad \nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (4.35)$$

en imposant la vitesse radiale à l'ICB et en supposant de plus que les contraintes tangentielles sont nulles à la surface de la graine. L'écoulement peut s'écrire, pour la fonction courant telle que définie au §4.2.1,

$$\psi = S_2 u_{\text{ic}} r_{\text{ic}}^2 \left[8 \left(\frac{r}{r_{\text{ic}}} \right)^3 - 3 \left(\frac{r}{r_{\text{ic}}} \right)^5 \right] \cos \theta \sin^2 \theta, \quad (4.36)$$

et est représenté sur la figure 4.7. L'écoulement connu, il est alors possible de calculer l'ellipticité résiduelle à partir de la continuité de la contrainte normale à l'ICB, qui donne

$$\epsilon = \frac{19}{5} \frac{\eta u_{\text{ic}}}{\Delta \rho_{\text{icb}} g r_{\text{ic}}^2} S_2 \simeq 10^{-10} \left(\frac{\eta}{10^{16} \text{ Pa.s}} \right) \left(\frac{u_{\text{ic}}}{10^{-11} \text{ m.s}^{-1}} \right) S_2 \quad (4.37)$$

qui reste très loin en dessous du seuil de détection sismologique (Souriau & Souriau, 1989). Les taux de déformation induits par cet écoulement sont très faibles, de l'ordre de $\dot{\epsilon} \sim S_2 u_{\text{ic}} / r_{\text{ic}} \sim 10^{-17} S_2 \text{ s}^{-1} \sim 3 \times 10^{-4} S_2 \text{ Ma}^{-1}$. Ces taux de déformation sont insuffisants pour créer une texture par déformation. Yoshida *et al.* (1996) envisagent un mécanisme de recristallisation sous contrainte dans le champ de contrainte non-hydrostatique associé à l'écoulement. La difficulté de ce mécanisme est le temps très long nécessaire pour produire un alignement conséquent dans le relativement faible champ de contrainte, de l'ordre de $\sigma \sim \eta S_2 u_{\text{ic}} / r_{\text{ic}}$. Avec une viscosité de l'ordre de 10^{21} Pa.s et $\sigma \sim 10^4 \text{ Pa}$, Yoshida *et al.* (1996) estiment qu'un alignement se développe en un temps ($\propto \sigma^{-2}$) de l'ordre de 8 Ga et permettrait le développement d'une faible texture durant l'histoire de la graine. Si la viscosité, et donc les contraintes, sont significativement plus faibles (Buffett, 1997; Van Orman, 2004), le temps nécessaire pour texturer la graine est plusieurs ordres de grandeur supérieur à l'âge de la graine.

Remarque Beaucoup de métaux *hcp* présentent une forte anisotropie de conductivité thermique, et il est possible que le fer ϵ présente une telle anisotropie. Si une texture anisotrope est présente dans la graine, il est possible qu'une anisotropie de conductivité thermique rétroagisse sur l'écoulement, comme schématisé sur la figure 4.8. Le sens de cette rétroaction, positif ou négatif, n'est pas clair pour l'instant, deux mécanismes (au moins) entrant en compétition.

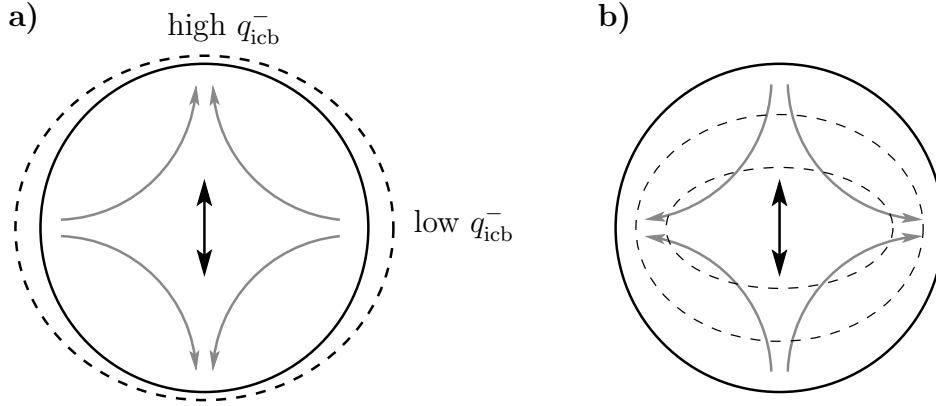


Figure 4.8 – Effets de rétroaction due à une conductivité thermique anisotrope, supposée ici plus grande suivant l'axe N-S. **a)** le flux thermique à l'ICB en provenance de la graine est plus grand aux pôles qu'à l'équateur, ce qui induit une croissance de la graine plus rapide à l'équateur, et un écoulement similaire à celui proposé par Yoshida *et al.* (1996), de l'équateur vers les pôles, pour garder la graine sphérique (flèches grises). **b)** En raison du flux plus important suivant l'axe N-S, la température à un rayon donné est plus faible au niveau de l'axe N-S qu'à l'équateur (isothermes représentées en trait tireté), ce qui induit un écoulement des pôles vers l'équateur (flèches grises).

4.2.3 Prise en compte de la stratification

On modélise la graine par un fluide newtonien contenu dans une sphère de rayon $r_{ic}(t)$ augmentant au cours du temps. La graine est supposée être stratifiée en densité. L'origine de cette stratification peut être à la fois compositionnelle et thermique, leur contribution pouvant être du même ordre, mais on se restreindra volontairement au cas chimique, plus simple à traiter, et pour lequel on a obtenu une expression analytique du profil moyen dans la graine. On se place dans le cadre de l'approximation de Boussinesq ; l'écoulement est supposé incompressible, $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$, et la conservation de la quantité de mouvement peut s'écrire

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \rho' \mathbf{g} + \eta \nabla^2 \mathbf{u} \quad (4.38)$$

où ρ est la densité moyenne de la graine, $\rho' = \beta \rho (c - \bar{c})$, $\beta = (1/\rho)(\partial \rho / \partial c)$ est le coefficient d'expansion compositionnelle, et p l'écart à la pression hydrostatique. L'accélération de la pesanteur est supposée varier linéairement avec r , $\mathbf{g} = -(dg/dr) r \mathbf{e}_r$, où $dg/dr = (4/3)\pi \mathcal{G} \rho \simeq 3.6 \times 10^{-6} \text{ s}^{-2}$. L'équation de Navier-Stokes est couplée à l'équation de transport d'éléments légers,

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla c = 0, \quad (4.39)$$

dans laquelle on a négligé la diffusion, le nombre de Péclet chimique $p_\chi = U r_{ic} / D \sim 10^4$, qui compare l'efficacité de l'advection à celle de la diffusion, étant grand devant 1.

Pour prendre en compte la croissance de la graine, on effectue le changement de variable $\tilde{r} = r / r_{ic}(t)$ afin de se ramener dans un système de coordonnées spatiales fixe. Les dérivées temporelles s'écrivent dans ce nouveau référentiel

$$\left. \frac{\partial}{\partial t} \right|_r = \left. \frac{\partial}{\partial t} \right|_{\tilde{r}} + \left. \frac{\partial \tilde{r}}{\partial t} \right|_r \left. \frac{\partial}{\partial \tilde{r}} \right|_t = \left. \frac{\partial}{\partial t} \right|_{\tilde{r}} - \tilde{r} \frac{u_{ic}}{r_{ic}} \left. \frac{\partial}{\partial \tilde{r}} \right|_t,$$

et les dérivées spatiales s'écrivent simplement

$$\left. \frac{\partial}{\partial r} \right|_t = \frac{1}{r_{ic}(t)} \left. \frac{\partial}{\partial \tilde{r}} \right|_t.$$

Le changement de variable introduit un terme d'advection radiale qui peut être interprété comme un terme de contraction : dans le nouveau référentiel, un point qui serait fixe dans l'espace physique voit son rayon diminuer à mesure que la graine croît. On adimensionne t , \mathbf{u} et p en choisissant comme valeurs de références τ_{ic} , $S_2 u_{ic}(t)$ et $p^* = \eta S_2 u_{ic}(t)/r_{ic}(t)$ (pression visqueuse) respectivement. On met la concentration à l'échelle en introduisant la concentration adimensionnelle χ ,

$$\chi = \frac{c(r, \theta, t) - \bar{c}(0)}{\bar{c}(r_{ic}) - \bar{c}(0)} = \frac{c(r, \theta, t) - \bar{c}(0)}{\Delta c(t)} \quad (4.40)$$

où $\Delta c(t)$ est la différence de concentration entre le centre de la graine et l'ICB au temps t . Notez que si l'adimensionnement des longueurs par $r_{ic}(t)$ simplifie considérablement le problème en le ramenant à un problème où toutes les frontières sont fixes, le choix d'utiliser des échelles qui dépendent du temps pour les autres variables n'est pas le plus simple, mathématiquement parlant. On aurait pu par exemple utiliser les valeurs actuelles de la vitesse de la graine et de Δc , mais cette simplification se fait au détriment du sens physique des paramètres adimensionnels, qui, avec l'adimensionnement choisi ici, gardent un sens physique à chaque temps.

Avec cet adimensionnement et le changement de variable en r , qui peut être vu comme un adimensionnement dynamique, le système d'équation s'écrit alors

$$Re(t) \left\{ \frac{r_{ic}}{u_{ic} \tau_{ic}} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{r_{ic} \dot{u}_{ic}}{u_{ic}^2} \mathbf{u} + (S_2 \mathbf{u} - \mathbf{r}) \cdot \nabla \mathbf{u} \right\} = -\nabla p - \frac{\mathcal{B}}{S_2} (\chi - \bar{\chi}) \mathbf{r} + \nabla^2 \mathbf{u}$$

$$\frac{\partial \chi}{\partial t} = -\tau_{ic} \frac{\dot{\Delta c}}{\Delta c} \chi - \frac{\tau_{ic}}{r_{ic}/u_{ic}} (S_2 \mathbf{u} - \mathbf{r}) \cdot \nabla \chi$$

où

$$\mathcal{B} = \frac{g(t) \Delta \rho_\chi(t) r_{ic}(t)^2}{\eta u_{ic}(t)}, \quad Re(t) = \frac{r_{ic}(t) u_{ic}(t)}{\nu}, \quad (4.41)$$

$\dot{\Delta c} = d(\Delta c)/dt$, $\nu = \eta/\rho_0$, $g(t) = (dg/dr)r_{ic}(t)$ est l'accélération de la pesanteur à l'ICB au temps t , et $\Delta \rho_\chi = \beta \rho_0 \Delta c$ est la différence de densité au temps t entre le centre de la graine et l'ICB. Si on suppose que la graine grandit en \sqrt{t} , le nombre de Reynolds reste alors constant au cours de la croissance de la graine et égal à $Re = r_{ic}^{*2}/(2\tau_{ic}\nu) \sim 10^{-16 \pm 5} \ll 1$, où r_{ic}^* est le rayon actuel de la graine ; comme de plus tous les termes en facteur de Re sont d'ordre 1, on peut négliger tous les termes d'inerties dans l'équation de Navier-Stokes qui devient donc

$$0 = -\nabla p - \frac{\mathcal{B}}{S_2} (\chi - \bar{\chi}) \mathbf{r} + \nabla^2 \mathbf{u} \quad (4.42a)$$

que l'on résoudra conjointement à l'équation de transport du soluté,

$$\frac{\partial \chi}{\partial t} = -\tau_{ic} \frac{\dot{\Delta c}}{\Delta c} \chi - \frac{\tau_{ic}}{r_{ic}/u_{ic}} (S_2 \mathbf{u} - \mathbf{r}) \cdot \nabla \chi. \quad (4.42b)$$

Le terme $-\tau_{ic} \frac{\dot{\Delta}c}{\Delta c} \chi$ est un terme puits qui intervient en raison du choix de l'adimensionnement de la concentration par une échelle dépendant du temps. $\dot{\Delta}c \sim (\Delta c/r_{ic})u_{ic}$ et donc $\tau_{ic} \frac{\dot{\Delta}c}{\Delta c} \sim \frac{\tau_{ic}}{r_{ic}/u_{ic}} \sim 1$.

De la même manière qu'en l'absence de stratification, on suppose que le temps de relaxation est très petit devant l'âge la graine, et que la vitesse radiale à l'ICB est égale à l'opposée de taux de croissance anisotrope. Nous supposons donc, comme l'on fait Yoshida *et al.* (1996) que le temps de relaxation est très petit devant l'âge de la graine. On suppose donc qu'il n'y a pas d'accumulation de matière au niveau de la ceinture équatoriale, en négligeant une ellipticité résiduelle qui sera elle aussi calculée *a posteriori*. La vitesse radiale dans la graine est donc imposée par la relaxation continue de la topographie entretenue par la croissance anisotrope de la graine et égale à l'opposée de l'anomalie de vitesse de cristallisation (Yoshida *et al.*, 1996)

$$u_r(r_{ic}, \theta, t) = u_{ic}(t) S_2 P_2(\cos \theta). \quad (4.43)$$

(Note : j'ai testé cette hypothèse dans une seconde version de ce code, où j'ai explicitement calculé à chaque pas de temps l'évolution de l'ellipticité dynamique, en prenant comme condition limite

$$\frac{dh_2^0}{dt} = S_2 u_{ic} + (u_r)_2^0 \quad (4.44)$$

où h_2^0 est l'amplitude de l'ellipticité et $(u_r)_2^0$ l'amplitude de la composante en Y_2^0 de la vitesse radiale à l'ICB. $(u_r)_2^0$ est calculé à chaque pas de temps à partir de la condition de continuité de la contrainte normale à l'ICB et du champ de contrainte de la graine, qui prend en compte l'effet de la déformation des surfaces isodensité. En partant d'une graine sphérique, l'ellipticité croît rapidement pendant un court transitoire, puis augmente régulièrement au cours de l'histoire de la graine en grande partie en raison de la déformation des surfaces isodensité qui induit une contrainte radiale qui soutient l'ellipticité. Le terme dh_2^0/dt est très petit et la condition limite choisie pour la vitesse ci-dessus est une très bonne approximation.)

On suppose de plus que les contraintes tangentielles à l'ICB sont nulles. Avec l'adimensionnement dynamique utilisé ici, la concentration adimensionnelle reste toujours égale à 1 à l'ICB.

Le système dépend de deux paramètres de contrôle. L'un est S_2 , qui quantifie le degré de croissance préférentielle à l'équateur. Le second est le nombre \mathcal{B} , que l'on a déjà rencontré au §4.2.1, qui compare les forces de flottabilité induite par la déformation des surfaces isodensité aux forces visqueuses. \mathcal{B} augmente de manière significative au cours de la croissance de la graine, en raison d'une part du renforcement de la stratification ($\Delta\rho_\chi \sim r_{ic}^3$ et $g(t) \propto r_{ic}$), et d'autre part en raison de l'augmentation de l'échelle spatiale de l'écoulement, qui rend moins efficace le transfert visqueux de quantité de mouvement. Afin d'être quantitatif, on suppose une croissance de la graine en $t^{1/2}$, correspondant à un bilan énergétique du noyau 'au premier ordre', où l'on suppose que le refroidissement séculaire est le terme source dominant. Le nombre \mathcal{B} évolue alors comme $r_{ic}^7 \propto t^{7/2}$. On utilisera aussi le nombre \mathcal{B}^* qui est le nombre \mathcal{B} actuel de la graine, dont l'ordre de grandeur est

$$\mathcal{B}^* = - \left(\frac{\Delta\rho}{5 \text{ kg.m}^{-3}} \right) \left(\frac{10^{16} \text{ Pa.s}}{\eta} \right) \left(\frac{10^{-11} \text{ m.s}^{-1}}{u_{ic}} \right) 3 \times 10^8. \quad (4.45)$$

L'essentiel de l'incertitude sur \mathcal{B} provient de notre très mauvaise connaissance de la viscosité de la graine, les valeurs publiées variant sur près de 10 ordres de grandeur, entre 10^{11} Pa.s et 10^{21} Pa.s (Jeanloz & Wenk, 1988; Yoshida *et al.*, 1996; Buffett, 1997; Van Orman, 2004). La valeur de S_2 est aussi très incertaine, et a d'ailleurs pu évoluer au cours de la croissance de la graine. Les dynamos numériques de Glatzmaier & Roberts (1998) et Aubert *et al.* (2008) suggèrent un taux de croissance à l'équateur de 20 à 30 % plus fort que le taux moyen (mais pour des paramètres très différents de ceux du noyau), ce qui se traduit par $S_2 \sim 2/5$.

Le système d'équations présenté ci-dessus est résolu en faisant débiter la simulation avec une graine 100 fois plus petite qu'actuellement, et en simulant sa croissance jusqu'à sa taille actuelle. La résolution numérique est effectuée avec le code dynamo *Parody* de Julien Aubert et Emmanuel Dormy, simplifié et adapté au problème de la déformation de la graine. Ce code utilise une formulation en poloïdal/toroïdal, décomposés sur la base des harmoniques sphériques sur chaque coquille sphérique de rayon r , et utilise un schéma en différences finies dans la direction radiale.

4.2.4 Résultats et discussion

La figure 4.9 montre les résultats de simulations pour trois valeurs de \mathcal{B}^* (-10^4 , -10^6 et -10^8), et $S_2 = 2/5$. Avec $\Delta\rho_\chi = -5 \text{ kg.m}^{-3}$ et $u_{ic} = 10^{-11} \text{ m.s}^{-1}$, ces valeurs correspondent à des viscosités de l'ordre de 10^{20} , 10^{18} et 10^{16} Pa.s respectivement. Chaque sous-figure est divisée en quatre quadrants qui correspondent aux temps adimensionnés $t = 0.25, 0.5, 0.75$ et 1 , dans le sens des aiguilles d'une montre en partant du quadrant situé en haut à droite. Sur la première ligne est représentée la fonction courant, avec les valeurs positives tracées en rouge et les valeurs négatives en bleu. La ligne du milieu représente une mesure du taux de déformation, le taux de déformation de Von Mises, en Ma^{-1} . En bas sont représentées les lignes isoconcentration, adimensionnées par la différence actuelle de concentration entre le centre de la graine et l'ICB.

Avec $\mathcal{B}^* = -10^4$ ($\eta \sim 10^{20}$ Pa.s, l'écoulement est initialement très proche de l'écoulement calculé par Yoshida *et al.* (1996) en l'absence de stratification, mais est progressivement confiné dans une couche superficielle à mesure que la graine grandit et que $|\mathcal{B}(t)|$ augmente. Le renforcement de la stratification rend de plus en plus difficile les mouvements radiaux et l'écoulement tend à devenir essentiellement horizontal. Une cellule de vorticit  oppos e appara t lorsque l' coulement principal est confin    proximit  de la surface de la graine. Celle-ci est entra n e par viscosit  par l' coulement de la couche sup rieure.

Pour de plus grandes valeurs de $|\mathcal{B}^*|$ (-10^6 et -10^8), la stratification s'oppose   tout mouvement vertical et contraint l' coulement    tre parall le aux surfaces isodensit . L' coulement est pour l'essentiel confin  dans une tr s fine couche fortement cisail e. En profondeur, l'entra nement visqueux par l' coulement superficiel donne naissance   une s rie de cellules dont la vorticit  est de signe altern . Le taux de d formation associ    ces cellules est faible cependant, et l'essentiel de la d formation a lieu pr s de la surface, o  la focalisation de l' coulement induit un cisaillement important. Avec $\mathcal{B}^* = -10^8$, le taux de d formation dans la couche superficielle est de l'ordre de $\dot{\epsilon} \sim 0.1 \text{ Ma}^{-1}$, et une d formation de l'ordre de 100 % dans cette couche peut  tre induite par cet  coulement en un temps de l'ordre de $1/\dot{\epsilon} \sim 10 \text{ Ma}$. Ce temps est tr s court en comparaison avec l' ge

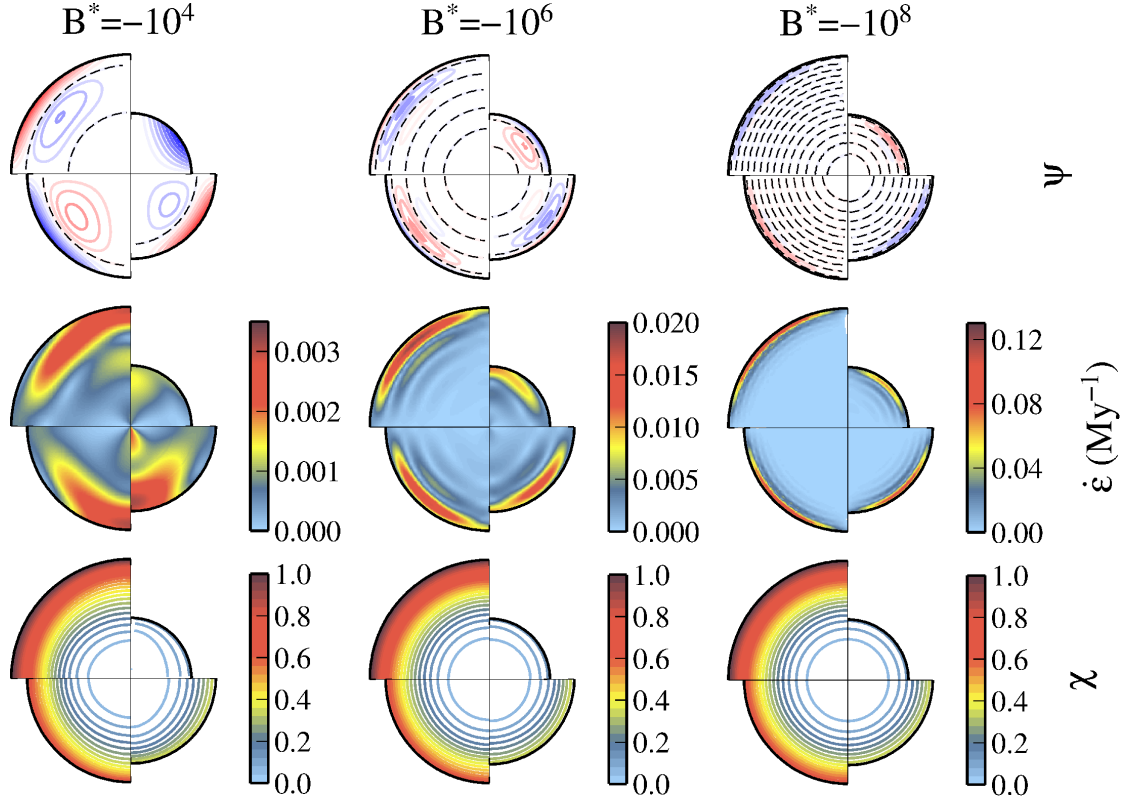


Figure 4.9 – Évolution de l'écoulement induit par une croissance équatoriale préférentielle de la graine en présence d'une stratification en densité, au cours de la croissance de la graine. Chaque sous-figure est divisée en quatre quadrants qui correspondent aux temps adimensionnés $t = 0.25, 0.5, 0.75$ et 1 , dans le sens des aiguilles d'une montre en partant du quadrant situé en haut à droite. En haut : fonction courant (rouge pour $\psi > 0$ et bleu pour $\psi < 0$) ; milieu : taux de déformation équivalent de von Mises en Ma^{-1} ; en bas : lignes isoconcentration. Pour ces calculs, on a pris $S_2 = 2/5$.

de la graine, ce qui suggère qu'une forte texture pourrait effectivement s'y développer. La géométrie de la déformation est très proche d'un cisaillement simple dans une grande partie de cette couche. Si la phase stable du fer dans les conditions de la graine est la phase *hcp*, les travaux de Poirier & Price (1999) et Wenk *et al.* (2000b) suggèrent que la déformation est accommodée essentiellement par le système de glissement basal. Dans ce cas, le plan basal du fer ϵ tend à s'aligner préférentiellement parallèlement à l'écoulement, et l'axe c perpendiculairement à l'écoulement. Un tel écoulement pourrait donc induire une texture radiale dans la partie superficielle de la graine. Une telle texture apparaîtrait 'isotrope' sismologiquement : des rais superficiels polaires ou équatoriaux rencontreraient la même orientation cristalline et ne présenteraient donc pas de différence de trajet significative.

Lois d'échelles

Les résultats numériques (figure 4.10) indiquent que, pour une grande gamme de valeurs de B et S_2 , l'épaisseur δ de la couche cisailante superficielle dépend du nombre

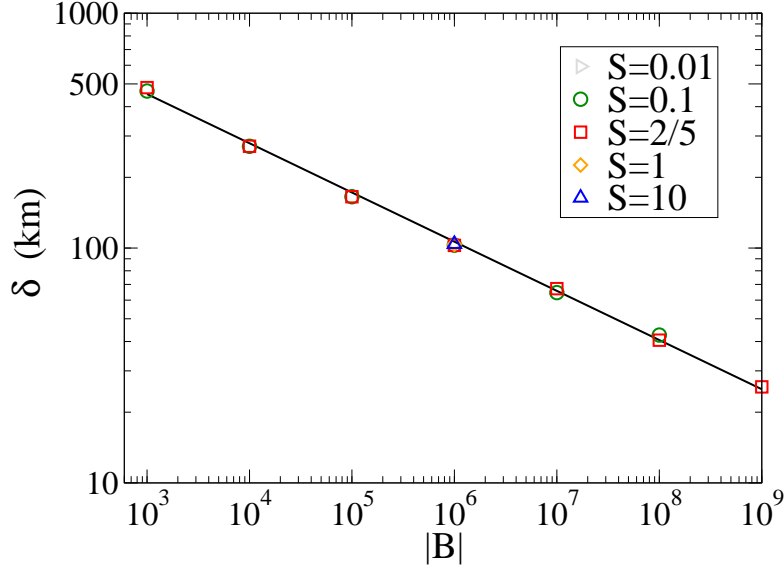


Figure 4.10 – Épaisseur δ de la couche cisailante superficielle, en fonction de \mathcal{B} , pour plusieurs valeurs de S_2 . δ est indépendant de S_2 et varie avec \mathcal{B} comme $\delta \simeq 1.6 r_{ic} \mathcal{B}^{-0.20 \pm 0.01}$.

\mathcal{B} comme $\delta \simeq 1.6 r_{ic} \mathcal{B}^{-0.20 \pm 0.01}$ et est indépendante de S_2 . On peut retrouver cette loi d'échelle en raisonnant comme suit.

On raisonne à nouveau en variables dimensionnées, directement à partir de la densité ρ' , et on note U la vitesse horizontale et W la vitesse verticale comme dans le §4.2.1. À l'ICB, la couche de fer nouvellement cristallisée a une densité homogène. À mesure que la graine grandit, cette couche est enfouie en profondeur et est déformée par l'écoulement. Au bout d'un temps t , la différence horizontale de densité dans cette couche est de l'ordre de

$$\rho' \sim \left| \frac{d\rho_0}{dr} \right| W t \quad (4.46)$$

ρ' atteindra son maximum à une profondeur de l'ordre de δ , qui marque la transition entre deux cellules de vorticit  oppos e.   ce point, la vitesse verticale change de signe et l' coulement tend ensuite   ramener les diff rences horizontales de densit  vers 0. Cette profondeur est atteinte au bout d'un temps de l'ordre de δ/u_{ic} , et la valeur maximale atteinte par ρ' est donc de l'ordre de

$$\rho' \sim \left| \frac{d\rho_0}{dr} \right| W \frac{\delta}{u_{ic}}. \quad (4.47)$$

  cette profondeur, la force d'Archim de induite par l'advection du champ de densit  est maximale et  quilibre le terme visqueux dans l' quation de Stokes (*cf.* §4.2.1), ce qui implique

$$\rho' \sim \frac{\eta r_{ic}}{g \delta^3} U. \quad (4.48)$$

En comparant les deux expressions de ρ' , et en utilisant le fait que, d'apr s la condition

d'incompressibilité ($\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$), $U/r_{ic} \sim W/\delta$, on obtient

$$\delta^4 \sim \frac{\eta r_{ic} u_{ic}}{g \left| \frac{d\rho_0}{dr} \right|} \frac{U}{W} \sim \frac{\eta r_{ic}^2 u_{ic}}{g \left| \frac{d\rho_0}{dr} \right|} \delta \quad (4.49)$$

soit

$$\delta \sim r_{ic} \mathcal{B}^{-1/5}. \quad (4.50)$$

Cette loi d'échelle est très bien vérifiée numériquement, et montre que la profondeur de pénétration de l'écoulement est indépendante de l'intensité du forçage.

On peut en déduire une loi d'échelle pour le taux de déformation. Dans cet écoulement, la déformation se fait essentiellement sous forme de cisaillement simple et le taux de déformation $\dot{\epsilon}$ est de l'ordre du rapport de la vitesse horizontale et de l'épaisseur de la couche δ . U est de l'ordre de $(r_{ic}/\delta)W \sim (r_{ic}/\delta)S_2 u_{ic}$ et on obtient

$$\dot{\epsilon} \sim \frac{U}{\delta} \sim \frac{S_2 u_{ic}}{r_{ic}} \mathcal{B}^{2/5}. \quad (4.51)$$

Là encore, cette loi d'échelle prédit de manière tout à fait satisfaisante l'ordre de grandeur du taux de déformation calculé numériquement (figure 4.9).

Une estimation *a posteriori* de la rhéologie et de la viscosité

Suivant le type de rhéologie, la déformation calculée ci-dessus induira ou non une texture. Un fluage par diffusion de lacunes atomiques ne produit aucune texture et peut même avoir tendance à détruire une texture préexistante. Un fluage par dislocation pourra en revanche aligner préférentiellement les cristaux dans le champ de déformation. On va chercher ici à estimer quelle rhéologie est la plus probable pour cet écoulement.

De manière générale, la relation entre le taux de déformation $\dot{\epsilon}$ et la contrainte σ peut s'exprimer sous la forme

$$\dot{\epsilon} = A \frac{D G b}{k_B T} \left(\frac{b}{d} \right)^p \left(\frac{\sigma}{G} \right)^n \quad (4.52)$$

où D est le coefficient de diffusion, G le module de cisaillement, b la norme du vecteur de Burgers (caractérisant la distorsion du maillage par les dislocations, de l'ordre de la distance inter-atomique), k_B la constante de Boltzmann, d la taille de grains, σ la contrainte cisailante. p , n et A sont des constantes sans dimension dépendant du mécanisme de déformation. La viscosité apparente est définie comme

$$\eta = \frac{\sigma}{\dot{\epsilon}}. \quad (4.53)$$

On considère généralement qu'aux hautes températures homologues (T/T_m où T_m est la température de fusion) de la graine, les deux mécanismes les plus probables sont le fluage par diffusion de lacunes atomiques (Nabarro-Herring), pour lequel $n = 1$ et $p \simeq 2$, et le fluage par dislocation (power-law creep), $n \simeq 3 - 5$ et $p = 0$ (Yoshida *et al.*, 1996; Karato, 2000; Vočadlo, 2007). Pour un état physique (température, taille des grains, etc...) et un champ de contraintes donnés, le mécanisme prédominant est celui que permet le plus grand taux de déformation, ou en d'autres termes celui dont la

viscosité efficace est la plus faible. Si au contraire le champ de déformation est donné, le mécanisme dominant est celui dont la viscosité à déformation constante est la plus faible (Poirier, 2000). Celle-ci peut s'écrire

$$\eta = \frac{\sigma(\dot{\epsilon})}{\dot{\epsilon}} = \left(\frac{k_B T}{A D b} \right)^{1/n} \left(\frac{d}{b} \right)^{p/n} G^{\frac{n-1}{n}} \dot{\epsilon}^{\frac{1-n}{n}}. \quad (4.54)$$

Le fluage par diffusion de lacunes est newtonien ($n = 1$), et la viscosité correspondante est

$$\eta_{\text{NH}} = \frac{k_B T d^2}{A_{\text{NH}} D b^3}, \quad (4.55)$$

alors que la viscosité du fluage par dislocation s'écrit, pour $p = 0$,

$$\eta_{\text{disl}} = \left(\frac{k_B T}{A_{\text{disl}} D b} \right)^{1/n} G^{\frac{n-1}{n}} \dot{\epsilon}^{\frac{1-n}{n}}. \quad (4.56)$$

Pour le fluage par dislocation D est le coefficient d'auto-diffusion D_{sd} , alors que pour le fluage par diffusion, D comporte en plus une contribution due à la diffusion le long des joints de grains. D'après Van Orman (2004), cette contribution est petite pour la taille de grains attendue dans la graine et on suppose donc que $D \simeq D_{sd}$. On montre expérimentalement que le coefficient D_{sd} de la plupart des métaux peut être exprimé en fonction de la température homologue seule, sans autres effets de la pression que l'évolution de T_m , sous la forme $D_{sd} = D_0 \exp(-gT_m/T)$, avec $g \sim 17$ (e.g. Poirier, 2000; Van Orman, 2004). Van Orman (2004) estime $D_0 \sim 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$, ce qui donne $D_{sd} \sim 10^{-13} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ pour une température homologue de l'ordre de ~ 0.9 . Avec $G = 2 \times 10^{11} \text{ Pa}$ (Dziewonski & Anderson, 1981), $b \sim 2 \times 10^{-10} \text{ m}$, $A_{\text{NH}} \sim 14 - 160$ (Van Orman, 2004), $A_{\text{disl}} \sim 10^6$ (Yoshida *et al.*, 1996) et $n = 4.5$, et $T \sim 5000 \text{ K}$, on obtient

$$\frac{\eta_{\text{disl}}}{\eta_{\text{NH}}} = \left(\frac{k_B T}{D_{sd} G b} \right)^{\frac{1-n}{n}} \left(\frac{b}{d} \right)^2 \frac{A_{\text{NH}}}{A_{\text{disl}}^{1/n}} \dot{\epsilon}^{\frac{1-n}{n}} \sim \left(\frac{1 \text{ m}}{d} \right)^2 \left(\frac{3 \times 10^{-4} \text{ Ma}^{-1}}{\dot{\epsilon}} \right)^{0.8} \quad (4.57)$$

Bergman (1998) estime une taille de grains typique de l'ordre de 100 m dans la graine, à partir d'une combinaison d'interprétations et d'interpolations diverses. Si la graine est déformée, ce que l'on suppose évidemment ici, la taille des grains est probablement fixée par un équilibre entre croissance de grains et recristallisation sous contraintes. Aux contraintes attendues dans la graine, Yoshida *et al.* (1996) et Bergman (1998) estiment une taille de grains à l'équilibre comprise entre 10 cm et 10 m. Avec ces valeurs et les taux de déformation obtenus dans nos simulations, un fluage par dislocation serait alors prédominant et on peut donc envisager le développement d'une texture induite par la déformation.

On peut tenter d'aller un peu plus loin en utilisant la loi d'échelle trouvée ci-dessus pour $\dot{\epsilon}$ en fonction de la viscosité. Avec de plus l'expression (4.56), que l'on peut réécrire $\eta_{\text{disl}} = \eta_0 (\dot{\epsilon}/\dot{\epsilon}_0)^{\frac{1-n}{n}}$, où $\eta_0 = 2 \times 10^{20} \text{ Pa} \cdot \text{s}$ et $\dot{\epsilon}_0 = 10^{-2} \text{ Ma}^{-1}$, on a à notre disposition deux relations indépendantes liant le taux de déformation et la viscosité, et l'on peut donc estimer ces deux valeurs. En notant $\mathcal{B}_{\eta_0} = -10^4$ la valeur que prend \mathcal{B} pour une viscosité égale à η_0 , on obtient, en supposant $S_2 = 2/5$,

$$\eta \sim \eta_0 \left(\frac{S_2 u_{\text{ic}}}{\dot{\epsilon}_0 r_{\text{ic}}} |\mathcal{B}_{\eta_0}|^{2/5} \right)^{\frac{5-5n}{2+3n}} \sim 3 \times 10^{20} \text{ Pa} \cdot \text{s}, \quad (4.58)$$

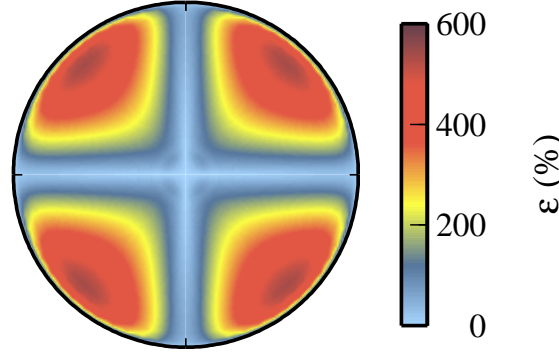


Figure 4.11 – Déformation cumulée, pour $\mathcal{B}^* = -10^8$ et une graine âgée d'un milliard d'années.

ainsi que $\delta \sim 200$ km. La situation est très proche de celle présentée dans la figure 4.9. Avec le taux de déformation prédit, $\sim 3 \times 10^{-3} \text{ Ma}^{-1}$, il faudrait ~ 300 Ma pour atteindre une déformation de l'ordre de 100 %. La texturation induite serait probablement relativement faible. Étant données les incertitudes sur les paramètres régissant la rhéologie, ces estimations restent cependant à considérer avec prudence.

Récemment, Van Orman (2004) a suggéré que le mode de déformation pouvait être du type Harper-Dorn, qui est un mécanisme de fluage par dislocation newtonien ($n = 1$) et indépendant de la taille de grain ($p = 0$). Van Orman (2004) estime que pour les contraintes attendues dans la graine, ce mécanisme doit être dominant. La viscosité associée est très faible, $\eta = 10^{11 \pm 1} \text{ Pa.s}$, ce qui impliquerait un nombre $\mathcal{B} \sim -10^{13 \pm 1}$ et permettrait un très fort taux de déformation. L'épaisseur de la première cellule serait de l'ordre de quelques kilomètres et le taux de déformation de l'ordre de $\sim 20 \text{ Ma}^{-1}$. Avec un tel taux de déformation, une déformation de l'ordre de 100 % est atteinte en $\sim 50\,000$ ans, un temps très court comparé à l'âge de la graine, et il est probable qu'une forte texture se développe alors.

Buffett (1997) propose une estimation de la viscosité de la graine permettant sa rotation différentielle malgré le couplage gravitationnel avec le manteau et obtient une viscosité de l'ordre de 10^{16} Pa.s pour une vitesse de rotation différentielle de l'ordre de $1^\circ/\text{an}$, ou une viscosité de l'ordre de 10^{17} Pa.s pour une vitesse de rotation différentielle de $0.1^\circ/\text{an}$. Une viscosité $\eta = 10^{16} \text{ Pa.s}$ correspond au cas $\mathcal{B}^* = -10^8$ de la figure 4.9, et induit une couche superficielle d'épaisseur $\delta \sim 30$ km. Ces viscosités relativement faibles permettent aussi une forte déformation sous l'ICB, avec des taux de déformation de l'ordre de 0.1 Ma^{-1} , qui permettent une déformation de l'ordre de 100 % en ~ 10 Ma. Dans ce laps de temps, la graine ne grandit que de 5 km environ, une distance inférieure à la distance δ . La figure 4.11 donne la déformation cumulée sur toute l'histoire de la graine, pour $\mathcal{B} = -10^8$ et un âge de la graine de 1 Ga; la déformation calculée est amplement suffisante pour induire une forte texturation.

Il est difficile de conclure de manière certaine sur le rôle du couplage entre croissance hétérogène de la graine et stratification étudié ici en raison des très grandes incertitudes qui subsistent sur la rhéologie du fer dans les conditions de la graine.

Si la viscosité est forte, le taux de déformation associé à l'écoulement est trop faible

pour induire une texture significative. L'écoulement découlant de la relaxation de la graine est néanmoins considérablement modifié par la présence d'une stratification même modeste. L'essentiel des contraintes induites par la croissance anisotrope est relaxé à proximité de la surface, dans une couche épaisse d'environ 200 km pour une viscosité de l'ordre de 3×10^{20} Pa.s. Par conséquent, le champ de contraintes est essentiellement hydrostatique en profondeur et il est donc peu probable que le mécanisme de recristallisation sous contrainte proposé par Yoshida *et al.* (1996) permette le développement d'une texture en mesure d'expliquer l'anisotropie sismique.

Si la viscosité est plus faible, comme proposé par Buffett (1997) ou Van Orman (2004), la présence d'une stratification focalise l'écoulement dans une fine couche superficielle où le taux de déformation est fort, suffisant pour induire une texture significative en un temps très court comparé à l'âge de la graine. Il est tentant de vouloir expliquer la couche isotrope observée sismologiquement à la surface de la graine par cet écoulement. Comme discuté ci-dessus, si la phase stable du fer est *hcp*, le plan basal des cristaux de fer tendrait préférentiellement à être orienté parallèlement à l'écoulement, et l'axe *c* serait alors orienté préférentiellement perpendiculairement à l'écoulement. La texture qui en résulterait serait radiale, à symétrie sphérique, et apparaîtrait isotrope sismologiquement. Le forçage ne se limite pas forcément à une anomalie de taux de cristallisation en $P_2(\cos \theta)$ comme étudié ici. Des variations du taux de croissance de la graine à plus petite échelle peuvent aussi contribuer à générer un écoulement fortement cisailant dans la partie superficielle de la graine. À plus grande échelle, l'asymétrie hémisphérique de taux de cristallisation prédit par Sumita & Olson (1999, 2002) et Aubert *et al.* (2008) induirait un forçage asymétrique qui est une piste intéressante pour expliquer l'asymétrie de la couche superficielle isotrope. La différence de forçage induirait une différence d'intensité de l'écoulement et du taux de déformation, et pourquoi pas un degré de texturation différent entre les hémisphères est et ouest. Aubert *et al.* (2008) proposent d'expliquer la différence de propriétés élastiques des hémisphères est et ouest en invoquant une différence de texture de cristallisation due à une différence de taux de cristallisation entre les deux hémisphères. La différence de taux de cristallisation entre les deux hémisphères est de l'ordre de 15 % dans leur modèle et il n'est pas clair qu'une différence de cet ordre suffise à induire une différence de texture suffisante pour expliquer les observations sismologiques. Plus important, si les auteurs insistent sur l'asymétrie est/ouest, la plus grande différence de taux de cristallisation dans leurs modèles est entre la zone équatoriale et les régions polaires (voir figure 4.6, page 98). Par conséquent, on devrait en premier lieu attendre une différence de texture entre les zones équatoriales et les zones polaires, à laquelle se superposerait une différence sans doute moins marquée entre hémisphères est et ouest. Il ne me semble pas que cela ait été observé, mais il est possible que la couverture incomplète des zones polaires ne permette pas de caractériser ces zones de la même manière que les régions de plus basses latitudes.

Une question de première importance lorsque l'on cherche à interpréter les observations sismologiques de la graine est de savoir si la structure observée résulte de phénomènes actuellement actifs ou est héritée de mécanismes de texturation actifs dans le passé. Van Orman (2004) soutient par exemple qu'une faible viscosité de la graine doit permettre de développer une texture en un temps géologiquement très court, et que par conséquent la graine ne garde pas de mémoire des déformations passées ou d'une texture acquise lors de la cristallisation. Lorsque le nombre \mathcal{B} est grand, seule une couche très superficielle est déformée, les zones plus profondes de la graine restant

inaffectées par la déformation. La même conclusion peut être tirée pour la déformation poloïdale induite par le champ magnétique toroïdal (Karato, 1999). Buffett & Bloxham (2000) ont montré qu'une stratification stable s'opposait de manière très effective à une déformation induite par le champ magnétique toroïdal, une conclusion suggérée aussi par l'analyse présentée au §4.2.1. Le mécanisme de déformation proposé par Buffett & Wenk (2001), où la composante azimutale de la force de Lorentz produit un écoulement zonal dans la graine, déforme essentiellement les couches les plus superficielles de la graine. Par conséquent il semble probable que si la graine est stratifiée de manière stable, d'éventuelles déformations seront limitées aux couches externes, la graine profonde n'étant affectée par aucun mécanisme de déformation. La texture de la graine profonde pourrait alors être interprétée comme une texture fossile, héritée de mécanismes actifs dans le passé.

Dans ce cadre de pensée, la question de savoir si l'axe de rotation de la graine est stable à l'échelle de quelques centaines de millions d'années peut être pertinente pour tenter de comprendre un éventuel basculement en profondeur de l'axe de l'anisotropie. Des études récentes suggèrent que la partie la plus profonde de la graine présenterait une orientation de l'anisotropie différente (Beghein & Trampert, 2003; Niu & Wen, 2008). Une possibilité est que ce changement de géométrie soit lié à un changement de phase dans la graine (*hcp* \leftrightarrow cubique?). Si la texture profonde est interprétée comme étant une texture fossile, une autre possibilité est d'invoquer une migration des pôles de la graine au cours de son histoire, qui pourrait expliquer le basculement de l'anisotropie fossile. L'axe de rotation de la graine est considéré comme étant très stable à des échelles de temps petites car le couple de rappel gravitationnel dû à l'ellipticité (induite par la rotation de la Terre) de la graine est très fort et empêche tout basculement de l'axe de rotation (Dumberry & Bloxham, 2002). Il est cependant envisageable que la graine puisse basculer à des échelles de temps longues si un couple (induit par une asymétrie hémisphérique de la convection dans le noyau?) est appliqué à la graine de manière durable. La déformation de la graine ou sa cristallisation/fusion pourrait permettre d'accomoder un basculement en limitant le couple gravitationnel.

4.3 Une étude comparative de différents mécanismes de déformation

Il est difficile de comparer de manière quantitative les différents mécanismes de déformation proposés pour expliquer l'anisotropie de la graine, leur présence et leur efficacité pouvant dépendre de différents facteurs. Cette partie présente une tentative de rationalisation et de comparaison objective des divers mécanismes de déformation proposés à ce jour. Deux facteurs me semblent particulièrement important : l'âge de la graine et sa viscosité. De l'âge de la graine, dépendent essentiellement la stratification de la graine - stable ou instable- et, dans une moindre mesure, le temps laissé à l'anisotropie pour se développer. De la viscosité, dépend directement l'intensité de l'écoulement et des taux de déformation.

Le point le plus important probablement concerne la stratification en densité de la graine. Si celle-ci est instable (géotherme super-adiabatique), la graine peut convecter et la déformation associée peut probablement induire une texture forte dans la graine (Wenk *et al.*, 2000a). Comme discuté dans la partie 4.1, cela nécessite que la graine soit jeune, peut-être trop selon les modèles d'évolution thermique du noyau. Si à l'inverse

la graine est stratifiée de manière stable, la convection thermique est interdite, et, de manière plus générale, tout mouvement radial doit être limité par les forces d'Archimède induites par un déplacement vertical de matière.

Le travail présenté ci-dessus montre clairement que l'écoulement proposé par Yoshida *et al.* (1996) est profondément altéré par la présence d'une stratification. À l'inverse, si la graine est stratifiée de manière instable, il est très peu probable que la texturation induite par le mécanisme de recristallisation sous contrainte proposé par Yoshida *et al.* (1996) survive aux déformations liées à la convection. Il semble donc que quelque soit l'état de stratification de la graine - stable ou instable - le mécanisme proposé par Yoshida *et al.* (1996) rencontre de sérieux problèmes. L'écoulement tel que calculé par Yoshida *et al.* (1996) peut subsister si la viscosité de la graine est très forte, mais il se pose alors le problème du temps nécessaire à l'acquisition d'un alignement préférentiel, qui est au minimum de l'ordre de grandeur de l'âge de la Terre.

Un écoulement poloïdal induit par le champ magnétique toroïdal, comme proposé par Karato (1999), rencontre les mêmes problèmes si la graine est stratifiée. Le raisonnement proposé dans le §4.2.1 suggère que le rapport des vitesses verticale et horizontale en présence d'une stratification doit être très petit devant 1, de l'ordre de 10^{-5} pour le jeu de paramètres utilisé. De manière similaire à ce qu'on a montré pour l'écoulement de Yoshida *et al.* (1996), l'écoulement induit par le champ magnétique poloïdal doit être confiné à la surface du noyau. Buffett & Bloxham (2000) montrent que les surfaces isodensité se déforment en réponse à l'écoulement induit par les forces de Lorentz jusqu'à équilibrer exactement celles-ci.

Même en l'absence de stratification, ce processus est probablement limité par le taux de cristallisation/fusion, lui même limité par la capacité de la convection dans le noyau à transférer la chaleur nécessaire à l'absorption ou au rejet de chaleur latente liée au changement de phase. Si le taux de cristallisation est lent comparé au temps typique de l'écoulement, la déformation de la graine induit une déformation de la surface de la graine qui s'écarte alors d'une surface équipotentielle. Dans ce cas, la contrainte de Maxwell peut être en partie équilibrée par les contraintes non-hydrostatiques liées à cette topographie. La contrainte de Maxwell radiale induite par le champ magnétique azimutal est de l'ordre de

$$\sigma_{rr} \sim \frac{B_\phi^2}{2\mu_0}$$

et est équilibrée par les contraintes induites par une topographie Δr , de l'ordre de $\sim \Delta r \Delta \rho_{icbg}$ pour une topographie de l'ordre de $\Delta r \sim B_\phi^2 / (2\mu_0 \Delta \rho_{icbg}) \sim 10^{-1 \pm 2}$ m pour $B_\phi \sim 10^{-2 \pm 1}$ T (Karato, 2000). Karato (1999, 2000) estime que le temps typique de fusion/cristallisation est très petit et que le changement de phase n'est pas le processus limitant. Aucune topographie ne subsisterait alors, la déformation de la graine n'est pas limitée et induit un taux de fusion/cristallisation significativement plus grand que le taux moyen de cristallisation de la graine. C'est une hypothèse forte, que je ne crois pas réaliste. L'estimation proposée au chapitre 2 §2.6.2 suggère que le temps typique associé à la fusion ou la cristallisation à l'ICB est de l'ordre de 1000 ans. Pour comparaison, la topographie estimée ci-dessus est formée en un temps de l'ordre de l'année si les vitesses de déformation sont de l'ordre de 10^{-9} m.s⁻¹ (pour B_ϕ et donc h petits) à 10^{-7} m.s⁻¹ (pour B_ϕ et donc h grands) comme calculé par Karato (1999). La cinétique de fusion/cristallisation semble donc être lente en comparaison avec le temps convectif

dans la graine et le changement de phase doit être le processus limitant. En pratique, on peut s'attendre à ce que la surface de la graine soit proche de l'équilibre mécanique entre contraintes de Maxwell et contraintes induites par la topographie. L'écoulement est alors limité par le taux de fusion/cristallisation de la topographie dynamique qui impose l'ordre de grandeur de la vitesse de déformation.

$$U \sim \frac{B^2 \delta^3}{\eta \mu r_{ic}^2} \quad (4.59)$$

$$\dot{\epsilon} \sim \frac{U}{\delta} \sim \frac{B^2}{\eta \mu} \left(\frac{\delta}{r_{ic}} \right)^2 \sim \left(\frac{\delta}{r_{ic}} \right)^2 \left(\frac{10^{16} \text{ Pa.s}}{\eta} \right) \text{ My}^{-1} \quad (4.60)$$

Buffett & Bloxham (2000) ont suggéré qu'un écoulement zonal pouvait être généré dans la graine par la composante azimutale de la force de Lorentz, qui résulte de l'interaction entre champ poloidal et toroïdal. Ce mécanisme est un candidat intéressant si la graine est stratifiée puisque l'écoulement est alors horizontal et n'est donc pas affecté par la présence de stratification. Son efficacité dépend en revanche de l'intensité du champ magnétique et de la viscosité de la graine. En utilisant une forme supposée du champ magnétique, Buffett & Bloxham (2000) calculent un champ de vitesse de la forme

$$u_\phi = -\frac{1}{10} \frac{B_z B_\phi(r_{ic}) r^3}{\mu \eta r_{ic}^2} \sin \theta \quad (4.61)$$

$$\sim \left(\frac{10^{16} \text{ Pa.s}}{\eta} \right) \left(\frac{B_z}{2 \text{ mT}} \right) \left(\frac{B_\phi}{20 \text{ mT}} \right) \left(\frac{r}{r_{ic}} \right)^3 3 \times 10^{-10} \text{ m.s}^{-1} \quad (4.62)$$

où θ est la colatitude, μ la perméabilité magnétique, η la viscosité, B_z la composante du champ magnétique parallèle à l'axe de rotation, et B_ϕ la composante azimutale du champ magnétique. Pour cet écoulement, la seule composante non nulle du tenseur des déformations est

$$\dot{\epsilon}_{r\phi} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_\phi}{\partial r} - \frac{u_\phi}{r} \right) \quad (4.63)$$

$$= \frac{u_\phi}{r} \sim \left(\frac{10^{16} \text{ Pa.s}}{\eta} \right) \left(\frac{B_z}{2 \text{ mT}} \right) \left(\frac{B_\phi}{20 \text{ mT}} \right) \left(\frac{r}{r_{ic}} \right)^2 2.5 \times 10^{-16} \text{ s}^{-1} \quad (4.64)$$

soit de l'ordre de 10^{-2} Ma^{-1} pour une viscosité de 10^{16} Pa.s et l'intensité du champ magnétique considérée par Buffett & Bloxham (2000) ; un taux de déformation de l'ordre de 100 % est alors atteint en $\sim 100 \text{ Ma}$. La viabilité d'un tel mécanisme dépend drastiquement de la viscosité solide : avec $\eta \sim 10^{20} \text{ Pa.s}$, l'écoulement et la déformation en résultant sont insignifiants, alors que pour les valeurs les plus faibles publiées, la vitesse de l'écoulement et le taux de déformation pourraient être très grands. Le taux de déformation dépend aussi très clairement de l'intensité du champ magnétique toroïdal, qui est peu connue car inaccessible à l'observation. Les valeurs de champ considérées par Buffett & Bloxham (2000) correspondent à un modèle de champ magnétique ayant un champ toroïdal fort.

On peut aller un peu plus loin en calculant la déformation cumulée depuis la nucléation de la graine, en intégrant la relation (4.64) entre le temps où une couche cristallise au

rayon r et le temps présent. Si on suppose que la croissance de la graine est en \sqrt{t} , l'intégration peut se faire analytiquement et on obtient

$$\epsilon(r, \theta) = \frac{1}{10} \frac{B_z B_\phi \tau_{ic}}{\mu_0 \eta} \sin \theta \left(\frac{r}{r_{ic}} \right)^2 \ln \left(\frac{r}{r_{ic}} \right), \quad (4.65)$$

que l'on a représenté sur la figure 4.12. La déformation cumulée est maximale dans le plan équatorial, en $r = r_{ic}/\sqrt{e} \simeq 740$ km, et vaut

$$\epsilon_{\max} = \frac{1}{20 e} \frac{B_z B_\phi}{\mu_0 \eta} \tau_{ic}. \quad (4.66)$$

Pour une graine âgée d'1 Ga et une viscosité de l'ordre de 10^{16} Pa.s, la déformation maximale dans la graine est de l'ordre de 100 %. Notez que le maximum de déformation a lieu à environ 500 km de profondeur, et est faible en profondeur et en surface. En terme de texturation, cela laisse suggérer une anisotropie faible dans une couche superficielle, une anisotropie maximale à des profondeurs intermédiaires, et une anisotropie moins marquée au centre de la graine, un modèle qui peut être compatible avec les observations sismologiques.

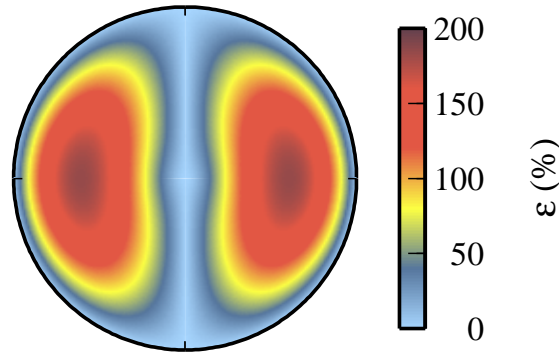


Figure 4.12 – Déformation cumulée résultant du modèle de déformation de Buffett & Wenk (2001), avec $\eta = 10^{16}$ Pa.s, $B_z = 2$ mT, $B_\phi = 20$ mT, pour une graine âgée de 1 Ga.

La figure 4.13 résume les principaux arguments exposés ci-dessus en proposant un diagramme de régime dans un espace viscosité/âge de la graine (normalisé par l'âge limite entre stratification stable et instable). Les valeurs des paramètres pertinents utilisés pour tracer les limites du diagramme sont réalistes mais étant données les très grandes incertitudes associées à chacun de ces processus (propriétés thermo-chimiques, intensité du champ magnétique, etc...), ce diagramme doit être vu comme essentiellement un schéma de principe. Pour la plupart des mécanismes, les 'limites' tracées sur ce graphe sont en partie arbitraires, et doivent plutôt être vues comme des frontières progressives.

Ce diagramme est d'abord divisé en deux domaines, suivant l'âge de la graine. Si la graine est jeune, elle est susceptible de convecter, si sa viscosité n'est pas trop grande. Si l'âge de la graine est plus grand, celle-ci est stratifiée de manière stable. (i) Le trait plein gris correspond à la limite de stabilité marginale de convection thermique, calculé avec le rayon actuel de la graine (le démarrage de la convection est alors très tardif dans l'histoire de la graine si la viscosité est proche de la viscosité critique). (ii) Le trait tireté orange correspond à la limite en dessous de laquelle le nombre de flottabilité $|\mathcal{B}|$

est supérieur à 10^3 , ordre de grandeur à partir duquel l'effet de la stratification sur la géométrie de l'écoulement devient significatif. Le mécanisme de déformation proposé par Karato (1999) est lui aussi limité par la stratification et est par conséquent peu probable si l'âge de la graine est plus grand que τ_{stab} . (iii) Le trait tireté vert correspond à la limite sous laquelle le maximum de la déformation cumulée en réponse au mécanisme de Buffett & Wenk (2001) est supérieur à 100 %. La déformation cumulée est d'autant plus grande que la viscosité de la graine est faible et que la graine est âgée. (iv) Il est raisonnable de penser qu'un certain degré de texturation soit acquis lors de la solidification quels que soient l'âge de la graine et sa viscosité, mais il est probable que la texture acquise lors de la cristallisation soit altérée ou même effacée si un mécanisme de déformation impliquant un fort taux de déformation est présent.

Si la stratification est stable, le mécanisme le plus plausible semble être celui de Buffett & Bloxham (2000) qui peut opérer et être efficace si la viscosité n'est pas trop forte. La texturation par solidification semble difficile à conserver, même si la stratification est stable, en particulier si une couche cisaillante telle que mise en évidence dans ce chapitre est présente. Enfin, le fait que les domaines d'existence de plusieurs mécanismes se recoupent permet d'envisager la possibilité de couplage entre différents mécanismes.

À ces contraintes dynamiques, s'ajoutent les contraintes géométriques apportées par la minéralogie. Celles-ci sont pour l'instant difficilement discriminantes en raison de l'incertitude sur la phase stable du fer dans la graine (*hcp* ou cubique?), de leur anisotropie (axe *c* rapide ou lent?), et des systèmes de glissement. Il y a tout lieu d'être optimiste, les progrès rapides, aussi bien du point de vue expérimental que numérique, laissent penser que des consensus sur ces questions sont à portée de main, et peuvent apporter des contraintes fortes. En particulier, s'il semble que du point de vue dynamique, le mécanisme de déformation le plus plausible soit celui de Buffett & Bloxham (2000), ce mécanisme nécessite que l'axe *c* du fer *hcp* soit l'axe lent, alors que la communauté minéralogique semble privilégier un modèle de fer ayant un axe *c* rapide.

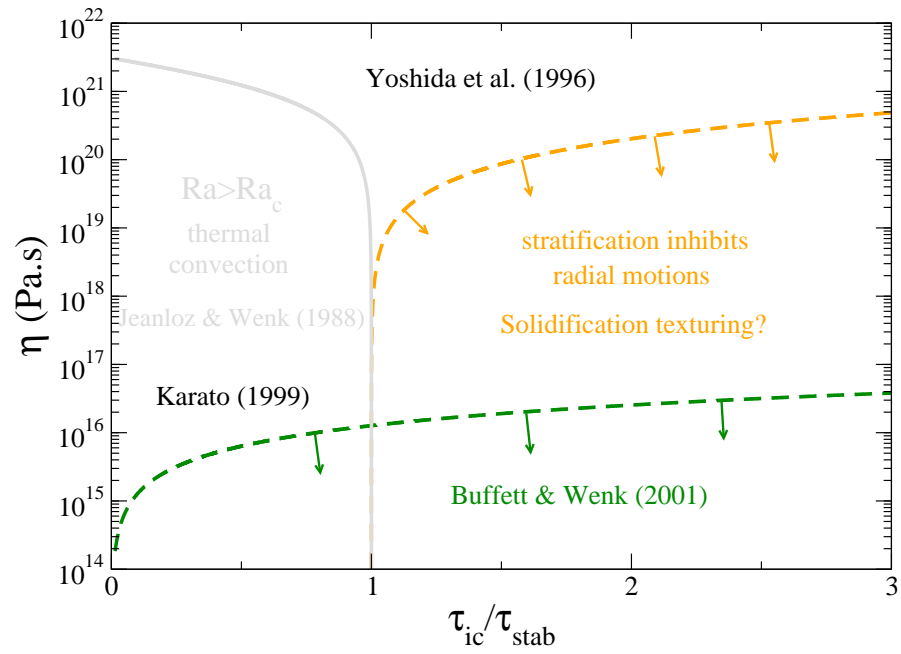


Figure 4.13 – Une vue comparative de différents régimes de déformation de la graine, dans un espace âge de la graine/viscosité. L'âge de la graine est normalisé par l'âge τ_{stab} au dessus duquel la stratification de la graine est stable.

5 Conclusions & perspectives

5.1 Régime de cristallisation de la graine

Il est relativement bien accepté dans la communauté de la géodynamique du noyau que la graine cristallise dans un régime dendritique (e.g. Fearn *et al.*, 1981; Bergman & Fearn, 1994; Bergman, 1997; Claßen *et al.*, 1999; Bergman *et al.*, 2003). Les conclusions du chapitre 2 sont plus nuancées. Il semble inévitable que la proximité immédiate de l'ICB soit en état de surfusion si celle-ci est plane, et l'analyse de stabilité linéaire du front de solidification prédit que celui-ci est instable. Cependant, le taux de croissance de l'instabilité morphologique est très petit comparé à la fréquence de pulsation de la couche limite, et les longueurs d'ondes instables sont sensiblement du même ordre de grandeur que l'épaisseur de déstabilisation de la couche limite compositionnelle. La proximité de l'interface doit donc être mélangée et perturbée sur des temps petits comparé au temps de croissance de l'instabilité morphologique, et à des échelles spatiales comparables aux longueurs d'ondes de l'instabilité morphologique. Il est suggéré que la convection doit alors jouer un rôle beaucoup plus important que dans les expériences de laboratoire. Il semble probable que l'évolution de l'instabilité soit affectée par la convection mais il est difficile à ce stade de prédire à quel point. À défaut d'apporter une conclusion ferme, ce travail met en évidence une limite de l'approche utilisée pour prédire le régime de solidification de la graine, et appelle d'autres études. Du point de vue théorique, il pourrait être possible d'étudier l'instabilité morphologique en présence d'un bruit important additionné aux champs de température et de concentration moyens. Expérimentalement, des expériences en centrifugeuse pourraient apporter des éléments de réponse, une gravité apparente importante intensifiant la convection sans pour autant affecter directement le taux de croissance de l'instabilité morphologique.

Les expériences très préliminaires présentées dans le chapitre 3 mettent en évidence l'importance du transport convectif de chaleur et de soluté sur la structure interne d'une zone dendritique. L'intensification des flux entre la zone dendritique et le liquide par le biais d'une convection vigoureuse a pour conséquence d'augmenter la fraction solide de la zone de mush. Ces observations, limitées pour l'instant, demandent évidemment à être confirmées par de nouvelles expériences, mais leur bon accord avec un modèle inspiré de Worster & Kerr (1994) est encourageant. Cet effet est potentiellement important pour la structure superficielle de la graine et la présence de liquide résiduel en profondeur.

Les perspectives expérimentales offertes par le dispositif de cristallisation en centrifugeuse sont nombreuses. Les premières expériences présentées au chapitre 3 doivent être suivies par une étude systématique de l'effet des divers paramètres de contrôle (gravité apparente, mais aussi composition chimique et forçage thermique) sur le régime de solidification. La compaction d'une zone dendritique sous son propre poids pourra

à terme être étudiée dans le dispositif expérimental développé au cours de ma thèse. Nous projetons d'utiliser des mélanges de camphène et de succinonitrile, qui sont des matériaux facilement déformables et couramment utilisés comme matériaux modèles pour l'étude de la cristallisation d'alliages métalliques. Un autre point intéressant est de tirer parti des variations de pression importantes imposées par la forte gravité apparente pour étudier l'effet sur le régime de solidification de la dépendance avec la pression de la température de cristallisation. Le camphène en particulier présente une forte pente de Clapeyron et pourrait être utilisé dans ce type d'expériences. Dans une expérience de seconde génération, il sera possible de réaliser des expériences de convection thermique dans des conditions où la compressibilité joue un rôle important, une situation omniprésente en géophysique mais jamais étudiée en laboratoire. L'accélération centrifuge développée à des vitesses de rotation de 10 000 à 20 000 rpm produit un gradient de pression qui peut être suffisant pour induire un gradient adiabatique mesurable dans un liquide en convection.

Nous avons aussi proposé un modèle qualitatif de formation d'une couche dense à la base du noyau. Le mécanisme avancé repose sur l'idée que la graine puisse fondre localement, en réponse par exemple à sa dynamique interne. Le produit de cette fusion serait du fer presque pur, de densité plus importante que le noyau externe, qui s'étendrait à la surface de la graine par écoulement gravitaire. Dans les zones où la cristallisation est majoritaire, des panaches de liquide riche en éléments légers entraîneraient partiellement cette couche et permettraient un mélange radial, pouvant donner lieu à une variation continue de composition entre l'ICB et le noyau externe. L'idée semble prometteuse et mérite une étude plus approfondie. Deux points en particulier nécessitent d'être abordés. (i) Il convient tout d'abord de quantifier la possibilité de fusion à la surface de la graine. Plusieurs mécanismes de déformation de la graine (Yoshida *et al.*, 1996; Karato, 1999; Buffett & Bloxham, 2000) peuvent s'accompagner, d'après leurs auteurs, d'une fusion localisée spatialement de la surface de la graine. Dans ces travaux, il est supposé explicitement ou implicitement que la fusion est immédiate dès lors que la surface de la graine s'écarte d'une surface équipotentielle. Le raisonnement proposé dans le paragraphe 2.6.2 remet en cause cette hypothèse et suggère au contraire que le taux de fusion doit être limité par la capacité à évacuer la chaleur latente liée au changement de phase. (ii) La dynamique de cette couche reste à explorer. Dans notre modèle, la structure de cette couche résulterait d'un équilibre dynamique entre un apport de liquide dense à sa base et son entraînement par des panaches de liquide léger et la convection ambiante dans le noyau externe. Nous avons réalisés quelques expériences préliminaires qui seront suivies dans les mois à venir par des expériences plus quantitatives.

5.2 Déformation de la graine et origine de l'anisotropie

Le chapitre 4 met en évidence le rôle déterminant de l'évolution thermique et chimique du noyau sur la dynamique de la graine. Le point le plus important est sans doute la stratification en densité de la graine, qui résulte de la contribution simultanée des profils de température et de concentration en éléments légers. La stratification thermique dépend essentiellement de l'âge de la graine (ou de manière équivalente, du taux de refroidissement du noyau). Le géotherme est super-adiabatique, et donc déstabilisant, si la graine est jeune, et sous-adiabatique, et donc stabilisant, si la graine est plus âgée. L'âge

critique déterminant la stabilité thermique de la graine est difficile à estimer en raison des très grandes incertitudes sur les paramètres thermophysiques pertinents, mais est probablement inférieur à 1 Ga. Les études les plus récentes sur l'évolution thermique du noyau rendent plausible une graine suffisamment jeune pour être instable thermiquement. La présence d'éléments radioactifs, initialement proposée comme une source d'énergie possible pour la convection thermique de la graine, n'est sans doute pas déterminante. À cette stratification thermique, s'ajoute une stratification chimique reflétant l'enrichissement en éléments légers du noyau.

Suivant la stabilité du profil de densité dans la graine, la dynamique de la graine peut prendre des formes très différentes.

Une stratification stable a pour effet de rendre la convection thermique impossible, mais s'oppose aussi de manière plus générale à tout mouvement vertical dans la graine. Les mécanismes proposés par Yoshida *et al.* (1996) et Karato (1999), qui impliquent une déformation essentiellement radiale dans la graine, sont très affectés par la présence d'une stratification stable et il est peu probable qu'ils puissent être à l'origine d'une anisotropie cylindrique. La déformation induite par une croissance hétérogène de la graine (Yoshida *et al.*, 1996) est focalisée à la surface de la graine dans une couche cisailante qui pourrait être importante pour la compréhension des propriétés élastiques de la couche externe de la graine. Si la graine est âgée et stratifiée, les mécanismes les plus plausibles du point de vue dynamique pour expliquer l'anisotropie de la graine semblent être le mécanisme de déformation induite par la force de Lorentz azimutale proposé par Buffett & Wenk (2001) si la viscosité du fer n'est pas trop grande, ou un mécanisme de texturation de solidification si la viscosité de la graine est suffisamment forte pour interdire des taux de déformation significatifs.

Si la graine est stratifiée de manière instable, elle peut - ou a pu - convecter. La convection dans la graine a déjà été étudiée (Weber & Machetel, 1992; Wenk *et al.*, 2000a), mais avec un forçage stationnaire et en l'absence de stratification chimique. Une modélisation de la convection prenant en compte la croissance de la graine et la mise en place d'une stratification compositionnelle stabilisante pourrait donner des résultats intéressants. Il est possible que la graine ait pu convecter thermiquement au début de son histoire et être progressivement stabilisée par la stratification chimique. Ce scénario peut être une piste intéressante pour expliquer une structure de la graine en deux couches, avec une texture profonde héritée d'un épisode convectif, et une couche superficielle stable, éventuellement cisailée par un écoulement forcé par une croissance hétérogène de la graine.

Le couplage entre flux de chaleur hétérogène à la CMB et croissance de la graine, proposé par Sumita & Olson (1999, 2002) et Aubert *et al.* (2008), est un mécanisme alléchant pour expliquer l'asymétrie hémisphérique des propriétés élastiques des couches externes de la graine. Aubert *et al.* (2008) proposent que la variation hémisphérique du taux de cristallisation de la graine s'accompagne d'une variation du degré de texturation acquise lors de la solidification. Une des difficultés rencontrées par ce modèle est que la variation hémisphérique de taux de croissance se superpose à une variation en latitude sans doute plus importante. On devrait donc observer au premier ordre une différence de texture entre les régions polaires et les régions équatoriales, à laquelle se superposerait un motif hémisphérique. Une autre possibilité est d'étendre le modèle proposé au chapitre 4 à un forçage non-axisymétrique. Une géométrie plus complexe que celle de l'écoulement axisymétrique calculé au chapitre 4 est attendue, ainsi qu'une différence de degré de

texturation associé à la différence de forçage entre les deux hémisphères.

Une étape importante pour comparer ces modèles aux observations sismologiques sera de prédire la texture développée lors de la déformation. Nous débutons une collaboration sur ce problème avec Sébastien Merkel (LSPES, Université de Lille) qui s'annonce prometteuse.

5.3 Perspectives planétologiques

Des études minéralogiques récentes montrent que le régime de cristallisation du noyau terrestre pourrait faire figure d'exception dans le système solaire. Aux pressions plus modestes qui règnent dans les noyaux des planètes telluriques ou des satellites rocheux de plus petite taille (Mars, Mercure, la Lune, Ganymède...), le profil de température de solidification serait plus raide que l'adiabat (Hauck *et al.*, 2006; Stewart *et al.*, 2007; Chen *et al.*, 2008). En conséquence, la solidification du noyau ne débiterait pas au centre du noyau comme sur Terre, mais au niveau de la CMB. Le fer solide étant plus dense que le liquide, les cristaux formés sous la CMB sont gravitationnellement instables et couleraient vers le centre du noyau. Ce régime, baptisé *snowing core regime*, pourrait apporter un flux de flottabilité significatif et participer au maintien d'une dynamo convective dans des planètes telluriques de petite taille.

Ce flux supplémentaire est potentiellement important pour expliquer la présence d'un champ magnétique d'origine interne sur Mercure et Ganymède. Il est considérablement plus difficile de maintenir une dynamo convective dans une petite planète, la raison principale étant que l'énergie gravitationnelle disponible pour maintenir le champ magnétique est approximativement proportionnelle au potentiel de gravité dans le noyau, qui évolue au premier ordre comme le carré du rayon du noyau.

On peut estimer l'énergie disponible pour maintenir la convection et la dynamo en calculant la variation d'énergie gravitationnelle associée à la redistribution de densité par la convection, que l'on peut mettre sous la forme

$$\Phi_g^T = -\frac{\alpha}{c_p} \left[\frac{1}{M_c} \int_V \rho \psi dV - \psi(r_c) \right] (Q_c - Q_k) \quad (5.1)$$

(*e.g.* Buffett *et al.*, 1996), où M_c est la masse du noyau, Q_{cmb} le flux de chaleur à la CMB et Q_k le flux de chaleur conduit le long de l'adiabat à la CMB, et ψ le potentiel gravitationnel. On note r_c le rayon du noyau, α le coefficient d'expansion thermique, c_p la capacité calorifique et ρ la densité. Le terme entre crochets est la différence entre le potentiel de gravité moyen sur le noyau et sa valeur à la CMB. En négligeant les variations radiales de densité, on obtient

$$\Phi_g^T = \frac{1}{5} \frac{r_c}{H_T} (Q_c - Q_k), \quad (5.2)$$

(*e.g.* Verhoogen, 1980), où $H_T = c_p/\alpha g_c$ est la longueur de compression dans le noyau. g_c est l'accélération de la gravité à la CMB, $\propto r_c$, et $\Phi_g^T \propto r_c^2$.

On peut effectuer un calcul similaire pour le *snowing core regime*, en faisant l'hypothèse que le solide formé à la CMB sédimente au centre du noyau sans subir de changement de phase significatif lors de son transport. En négligeant encore les variations

radiales de densité, la puissance libérée par la sédimentation est

$$\Phi_g^c = \frac{1}{2} \frac{c_p}{\alpha L} \frac{\Delta \rho}{\rho} \left[1 - \left(\frac{r_{ic}}{r_c} \right)^2 \right] \frac{r_c}{H_T} Q_c, \quad (5.3)$$

où $\Delta \rho$ est la différence de densité entre les phases solide et liquide, et r_{ic} est le rayon de la graine formée par la sédimentation des cristaux de fer. L'application numérique montre que ce terme est environ dix fois supérieur à la puissance associée à la convection thermique. Cette grande différence résulte essentiellement du fait que le contraste de densité entre phases solide et liquide est grand comparé aux variations de densité associées à la convection thermique. Cette estimation est presque certainement surestimée, car il est probable que la phase solide se dissout en partie avant de se déposer, mais elle suggère néanmoins que ce régime de cristallisation pourrait être une source énergétique importante pour le maintien d'une dynamo.

Ce régime est mal compris aujourd'hui. Pour une application planétologique, il serait intéressant de construire un modèle énergétique de ce type de convection, basé sur des bilans d'énergie et d'entropie. Cela nécessite de comprendre au moins les grandes lignes de la dynamique de ce type de convection, ainsi que la manière dont évolue l'état moyen thermique et chimique du noyau. Il semble possible d'étudier expérimentalement la convection générée par la sédimentation de cristaux cristallisés par le haut, en utilisant des solutions aqueuses (de chlorure d'ammonium ou d'autres sels).

À une plus petite échelle, un régime similaire a pu opérer dans les noyaux des corps parents des météorites ferreuses. Il a été proposé, pour les mêmes raisons, que la cristallisation de ces noyaux devait s'initier à la frontière noyau-manteau (Haack & Scott, 1992). Haack & Scott (1992) proposent ainsi qu'une zone dendritique fixée à la CMB cristallise progressivement vers le centre du noyau. Ce modèle rencontre des difficultés importantes pour expliquer le degré de différenciation chimique observé dans les différentes familles de météorites ferreuses (*e.g.* Haack & Scott, 1993; Ulf-Moller, 1998; Wasson, 1999; Chabot & Drake, 1999). Dans cette configuration, le liquide interdendritique est enrichi en soufre et stable vis-à-vis de la convection. Les flux de matières entre la zone dendritique et le noyau interne liquide sont en conséquences minimes et la différenciation chimique du noyau est insuffisante pour expliquer le degré de différenciation observé. Ce problème est discuté dans un article à soumettre, présenté dans l'annexe C. Il est montré en particulier que la croissance d'une zone dendritique à la CMB peut s'accompagner d'une cristallisation secondaire au centre du noyau, celui-ci devenant saturé au cours de l'évolution du noyau. Cette cristallisation secondaire permet un certain de degré de différenciation, mais qui semble insuffisant pour expliquer les observations. Un flux important de fer solide en provenance de la CMB, suivi de leur sédimentation peut en revanche expliquer les degrés importants de différenciation chimique observés dans la plupart des familles de météorites ferreuses.

Bibliographie

- F. ALBARÈDE. *Introduction to Geochemical Modeling*. ISBN 0521578043. Cambridge, UK : Cambridge University Press., 1996.
- D. ALFÈ, M. J. GILLAN, and G. D. PRICE. The melting curve of iron at the pressures of the Earth's core from ab initio calculations. *Nature*, 401 :462–464, 1999.
- D. ALFÈ, M. J. GILLAN, and G. D. PRICE. Constraints on the composition of the Earth's core from ab initio calculations. *Nature*, 405 :172–175, 2000.
- D. ALFÈ, M. J. GILLAN, and G. D. PRICE. Composition and temperature of the Earth's core constrained by combining ab initio calculations and seismic data. *Earth and Planetary Science Letters*, 195 :91–98, January 2002a.
- D. ALFÈ, M. J. GILLAN, and G. D. PRICE. Ab initio chemical potentials of solid and liquid solutions and the chemistry of the Earth's core. *J. Chem. Phys.*, 116 : 7127–7136, April 2002b.
- D. ALFÈ, G. D. PRICE, and M. J. GILLAN. Iron under Earth's core conditions : Liquid-state thermodynamics and high-pressure melting curve from ab initio calculations. *Physical Review B*, 65(16) :165118–+, 2002c.
- D. ALFÈ, L. VOCADLO, G. D. PRICE, and M. J. GILLAN. Melting curve of materials : theory versus experiments. *Journal of Physics Condensed Matter*, 16 :973–+, 2004.
- C. J. ALLÈGRE, J.-P. POIRIER, E. HUMLER, and A. W. HOFMANN. The chemical composition of the Earth. *Earth and Planetary Science Letters*, 134 :515–526, 1995.
- O. L. ANDERSON and A. DUBA. Experimental melting curve of iron revisited. *J. Geophys. Res.*, 102 :22659–22670, 1997.
- D. ANDRAULT, G. FIQUET, M. KUNZ, F. VISOCEKAS, and D. HAUSERMANN. The Orthorhombic Structure of Iron : An in Situ Study at High-Temperature and High-Pressure. *Science*, 278 :831–+, October 1997.
- D. ANDRAULT, G. FIQUET, T. CHARPIN, and T. LE BIHAN. Structure analysis and stability field of b-iron at high pressure and temperature. *Am. Mineral.*, 85 :364–371, 2000.
- D. ANTONANGELI, F. OCCELLI, H. REQUARDT, J. BADRO, G. FIQUET, and M. KRISCH. Elastic anisotropy in textured hcp-iron to 112 GPa from sound wave propagation measurements. *Earth and Planetary Science Letters*, 225 :243–251, 2004.

- D. ANTONANGELI, S. MERKEL, and D. L. FARBER. Elastic anisotropy in hcp metals at high pressure and the sound wave anisotropy of the Earth's inner core. *Geophys. Res. Lett.*, 33 :24303–+, December 2006.
- J. AUBERT, H. AMIT, G. HULOT, and P. OLSON. Thermochemical flows couple the Earth's inner core growth to mantle heterogeneity. *Nature*, 454 :758–761, 2008.
- J. AURNOU, D. BRITO, and P. OLSON. Anomalous rotation of the inner core and the toroidal magnetic field. *J. Geophys. Res.*, 103 :9721–9738, 1998.
- J. M. AURNOU, D. BRITO, and P. L. OLSON. Mechanics of inner core super-rotation. *Geophys. Res. Lett.*, 23 :3401–3404, 1996.
- J. BADRO, G. FIQUET, F. GUYOT, E. GREGORYANZ, F. OCCELLI, D. ANTONANGELI, and M. D'ASTUTO. Effect of light elements on the sound velocities in solid iron : Implications for the composition of Earth's core. *Earth and Planetary Science Letters*, 254 :233–238, 2007.
- C. BEGHEIN and J. TRAMPERT. Robust Normal Mode Constraints on Inner-Core Anisotropy from Model Space Search. *Science*, 299 :552–555, January 2003.
- A. B. BELONOSHKO, R. AHUJA, and B. JOHANSSON. Quasi-Ab Initio Molecular Dynamic Study of Fe Melting. *Physical Review Letters*, 84 :3638–3641, 2000.
- A. B. BELONOSHKO, N. V. SKORODUMOVA, A. ROSENGREN, and B. JOHANSSON. Elastic Anisotropy of Earth's Inner Core. *Science*, 319 :797–, 2008.
- M. I. BERGMAN. Measurements of elastic anisotropy due to solidification texturing and the implications for the Earth's inner core. *Nature*, 389 :60–63, 1997.
- M. I. BERGMAN. Estimates of the Earth's inner core grain size. *Geophys. Res. Lett.*, 25 :1593–1596, 1998.
- M. I. BERGMAN and D. R. FEARN. Chimneys on the Earth's inner-outer core boundary? *Geophys. Res. Lett.*, 21 :477–480, 1994.
- M. I. BERGMAN, L. GIERSCHE, M. HINCZEWSKI, and V. IZZO. Elastic and attenuation anisotropy in directionally solidified (hcp) zinc, and the seismic anisotropy in the Earth's inner core. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 117 :139–151, 2000.
- M. I. BERGMAN, S. AGRAWAL, M. CARTER, and MACLEOD-SILBERSTEIN M.. Transverse solidification textures in hexagonal close-packed alloys. *J. Crystal Growth*, 255 : 204–211, 2003.
- M. I. BERGMAN, M. MACLEOD-SILBERSTEIN, M. HASKEL, B. CHANDLER, and N. AKPAN. A laboratory model for solidification of Earth's core. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 153 :150–164, 2005.
- J. BHATTACHARYYA, P. SHEARER, and G. MASTERS. Inner Core Attenuation From Short-Period Pkp(Bc) Versus Pkp(Df) Waveforms. *Geophysical Journal International*, 114 :1–11, July 1993.
- F. BIRCH. The alpha-gamma transformation of iron at high pressures, and the problem of the Earth's magnetism. *Amer. J. Sci.*, 1940.

- F. BIRCH. Elasticity and Constitution of the Earth's Interior. *J. Geophys. Res.*, 57 : 227–+, June 1952.
- F. BIRCH. Density and Composition of Mantle and Core. *J. Geophys. Res.*, 69 :4377–+, October 1964.
- R. BOEHLER. Temperatures in the Earth's core from melting-point measurements of iron at high static pressures. *Nature*, 363 :534–536, 1993.
- W. F. BOTTKÉ, D. NESVORNÝ, R. E. GRIMM, A. MORBIDELLI, and D. P. O'BRIEN. Iron meteorites as remnants of planetesimals formed in the terrestrial planet region. *Nature*, 439 :821–824, 2006.
- S. I. BRAGINSKY. Formation of the stratified ocean of the core. *Earth and Planetary Science Letters*, 243 :650–656, March 2006.
- S.I. BRAGINSKY. Structure of the F layer and reasons for convection in the Earth's core. *Dokl. Akad. Nauk. SSSR Engl. Trans.*, 149 :1311–1314, 1963.
- A. D. BRANDON and R. J. WALKER. The debate over core mantle interaction. *Earth and Planetary Science Letters*, 232 :211–225, April 2005. doi : 10.1016/j.epsl.2005.01.034.
- A. D. BRANDON, R. J. WALKER, J. W. MORGAN, M. D. NORMAN, and H. M. PRICHARD. Coupled 186Os and 187Os Evidence for Core-Mantle Interaction. *Science*, 280 :1570–+, June 1998.
- L. BRÉGER, B. ROMANOWICZ, and S. ROUSSET. New constraints on the structure of the inner core from P'P'. *Geophys. Res. Lett.*, 27 :2781–2784, 2000a.
- L. BRÉGER, H. TKALČIĆ, and B. ROMANOWICZ. The effect of D'' on PKP(AB-DF) travel time residuals and possible implications for inner core structure. *Earth and Planetary Science Letters*, 175 :133–143, 2000b.
- D. BRITO, D. ELBERT, and P. OLSON. Experimental crystallization of gallium : ultrasonic measurements of elastic anisotropy and implications for the inner core. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 129 :325–346, 2002.
- J. M. BROWN and R. G. MCQUEEN. Phase transitions, Grüneisen parameter, and elastitraditionnellement iron between 77 GPa and 400 GPa. *J. Geophys. Res.*, 91 : 7485–7494, June 1986.
- S. G. BRUSH. Discovery of the Earth's core. *American Journal of Physics*, 48 :705–724, 1980.
- B. A. BUFFETT. Geodynamics estimates of the viscosity of the Earth's inner core. *Nature*, 388 :571–573, 1997.
- B. A. BUFFETT. A bound on heat flow below a double crossing of the perovskite-postperovskite phase transition. *Geophys. Res. Lett.*, 34 :17302–+, September 2007.
- B. A. BUFFETT and J. BLOXHAM. Deformation of Earth's inner core by electromagnetic forces. *Geophys. Res. Lett.*, 27 :4001–4004, 2000.

- B. A. BUFFETT and H.-R. WENK. Texturing of the Earth's inner core by Maxwell stresses. *Nature*, 413 :60–63, September 2001.
- B. A. BUFFETT, H. E. HUPPERT, J. R. LISTER, and A. W. WOODS. On the thermal evolution of the Earth's core. *J. Geophys. Res.*, 101 :7989–8006, 1996.
- B. A. BUFFETT, E. J. GARNERO, and R. JEANLOZ. Sediments at the Top of Earth's Core. *Science*, 290 :1338–1342, 2000.
- B. A. BUFFETT, E. J. GARNERO, and R. JEANLOZ. Response to Morse's "Porous Sediments at the Top of Earth's Core?". *Science*, 291 :2092–2093, 2001.
- F. H. BUSSE. Thermal instabilities in rapidly rotating systems. *Journal of Fluid Mechanics*, 44 :441–460, 1970.
- M. CALVET and L. MARGERIN. Constraints on grain size and stable iron phases in the uppermost inner core from multiple scattering modeling of seismic velocity and attenuation. *Earth and Planetary Science Letters*, 267 :200–212, 2008.
- M. CALVET, S. CHEVROT, and A. SOURIAU. P-wave propagation in transversely isotropic media : II. Application to inner core anisotropy : Effects of data averaging, parametrization and a priori information. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 156 :21–40, June 2006. doi : 10.1016/j.pepi.2006.01.008.
- A. CAO and B. ROMANOWICZ. Constraints on density and shear velocity contrasts at the inner core boundary. *Geophys. J. Int.*, 157 :1146–1151, 2004.
- A. CAO, B. ROMANOWICZ, and N. TAKEUCHI. An Observation of PKJKP : Inferences on Inner Core Shear Properties. *Science*, 308 :1453–1455, June 2005.
- A. CAO, Y. MASSON, and B. ROMANOWICZ. Short wavelength topography on the inner-core boundary. *Proceedings of the National Academy of Science*, 104 :31–35, January 2007.
- P. CARDIN and P. OLSON. Chaotic thermal convection in a rapidly rotating spherical shell : consequences for flow in the outer core. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 82 :235–259, 1994.
- N. L. CHABOT and M. J. DRAKE. Crystallization of magmatic iron meteorites : The role of mixing in the molten core. *Meteoritics and Planetary Science*, 34 :235–246, 1999.
- B. CHEN, J. LI, and S. A. HAUCK. Non-ideal liquidus curve in the Fe-S system and Mercury's snowing core. *Geophysical Research Letters*, 35 :7201–+, 2008. doi : 10.1029/2008GL033311.
- C. F. CHEN and F. CHEN. Experimental study of directional solidification of aqueous ammonium chloride solution. *Journal of Fluid Mechanics*, 227 :567–586, June 1991.
- S. CLASSEN, M. HEIMPEL, and U. CHRISTENSEN. Blob instability in rotating compositional convection. *Geophysical Research Letters*, 26 :135–138, January 1999.
- J. R. CLEARY. Seismic Wave Scattering near the Core-Mantle Boundary : a New Interpretation of Precursors to PKP. *Nature*, 240 :549–551, December 1972.

- R. E. COHEN, L. STIXRUDE, and E. WASSERMAN. Tight-binding computations of elastic anisotropy of Fe, Xe, and Si under compression. *Physical Review B*, 56 :8575–8589, October 1997.
- S. M. COPLEY, A. F. GIAMEI, S. M. JOHNSON, and M. F. HORNBECKER. The origin of freckles in unidirectionally solidified castings. *Metallurgical Transactions*, 1 :2193–2204, August 1970.
- V. F. CORMIER and X. LI. Frequency-dependent seismic attenuation in the inner core 2. A scattering and fabric interpretation. *Journal of Geophysical Research (Solid Earth)*, 107 :2362–+, December 2002.
- V. F. CORMIER and A. STROUJKOVA. Waveform search for the innermost inner core. *Earth and Planetary Science Letters*, 236 :96–105, July 2005.
- A. S. CÔTÉ, L. VOČADLO, and J. P. BRODHOLT. Light elements in the core : Effects of impurities on the phase diagram of iron. *Geophys. Res. Lett.*, 35 :5306–+, 2008.
- K. C. CREAGER. Anisotropy of the inner core from differential travel times of the phases PKP and PKIKP. *Nature*, 356 :309–314, 1992.
- K. C. CREAGER. Large-scale variations in inner core anisotropy. *Journal of Geophysical Research*, 104 :23127–23139, October 1999.
- P. CUMMINS and L. JOHNSON. Synthetic seismograms for an inner core transition of finite thickness. *Geophysical Journal*, 94 :21–34, 1988.
- S. H. DAVIS. *Theory of Solidification*. pp. 400. Cambridge, UK : Cambridge University Press., 2001.
- R. DEGUEN and P. CARDIN. Tectonic history of the Earth’s inner core preserved in its seismic structure. *Nature Geoscience*, 2 :419–422, 2009.
- R. DEGUEN, T. ALBOUSSIÈRE, and D. BRITO. On the presence and structure of a mush at the inner core boundary of the Earth. *Phys. Earth Planet. Inter.*, 274 :1887–1891, 2007.
- A. DEUSS, J. H. WOODHOUSE, H. PAULSEN, and J. TRAMPERT. The observation of inner core shear waves. *Geophysical Journal International*, 142 :67–73, July 2000.
- D. J. DOORNBOS. The Anelasticity of the Inner Core. *Geophysical Journal International*, 38 :397–415, August 1974.
- G. DREIBUS and H. PALME. Cosmochemical constraints on the sulfur content in the Earth’s core. *Geochimica and Cosmochimica Acta*, 60 :1125–1130, April 1996.
- L. DUBROVINSKY, N. DUBROVINSKAIA, O. NARYGINA, I. KANTOR, A. KUZNETZOV, V. B. PRAKAPENKA, L. VITOS, B. JOHANSSON, A. S. MIKHAYLUSHKIN, S. I. SIMAK, and I. A. ABRIKOSOV. Body-Centered Cubic Iron-Nickel Alloy in Earth’s Core. *Science*, 316 :1880–, 2007.
- M. DUMBERRY and J. BLOXHAM. Inner core tilt and polar motion. *Geophysical Journal International*, 151 :377–392, November 2002.

- A. M. DZIEWONSKI and D. L. ANDERSON. Preliminary reference Earth model. *Phys. Earth Planet. Inter.*, 25 :297–356, 1981.
- A. M. DZIEWONSKI and F. GILBERT. Solidity of the inner core of the earth inferred from normal mode observations. *Nature*, 234 :465–466, December 1971.
- A.J. FALZONE and F.D. STACEY. Second order elasticity theory : Explanation for the high Poisson’s ratio of the inner core. *Phys. Earth Planet. Inter.*, 21 :371–377, 1980.
- D. R. FEARN and D. E. LOPER. Compositional convection and stratification of earth’s core. *Nature*, 289 :393–+, January 1981.
- D. R. FEARN and D. E. LOPER. The evolution of an iron-poor core I. Constraints on the growth of the inner core. In A. M. SOWARD, editor, *Stellar and Planetary Magnetism*, pages 351–+, 1983.
- D.R. FEARN, D.E. LOPER, and P.H. ROBERTS. Structure of the Earth’s inner core. *Nature*, 292 :232–233, 1981.
- G. FIQUET, J. BADRO, F. GUYOT, H. REQUARDT, and M. KRISCH. Sound Velocities in Iron to 110 Gigapascals. *Science*, 291 :468–471, 2001.
- C. M. S. GANNARELLI, D. ALFÈ, and M. J. GILLAN. The particle-in-cell model for ab initio thermodynamics : implications for the elastic anisotropy of the Earth’s inner core. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 139 :243–253, 2003.
- C. M. S. GANNARELLI, D. ALFÈ, and M. J. GILLAN. The axial ratio of hcp iron at the conditions of the Earth’s inner core. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 152 :67–77, September 2005.
- R. GARCIA. Constraints on upper inner-core structure from waveform inversion of core phases. *Geophysical Journal International*, 150 :651–664, September 2002.
- R. GARCIA and A. SOURIAU. Inner core anisotropy and heterogeneity level. *Geophys. Res. Lett.*, 27 :3121–3124, 2000.
- C. K. GESSMANN and B. J. WOOD. Potassium in the Earth’s core? *Earth and Planetary Science Letters*, 200 :63–78, 2002.
- C. K. GESSMANN, B. J. WOOD, D. C. RUBIE, and M. R. KILBURN. Solubility of silicon in liquid metal at high pressure : implications for the composition of the Earth’s core. *Earth and Planetary Science Letters*, 184 :367–376, January 2001.
- G. A. GLATZMAIER and P. H. ROBERTS. A three-dimensional convective dynamo solution with rotating and finitely conducting inner core and mantle. *Phys. Earth Planet. Inter.*, 91 :63–75, 1995.
- G. A. GLATZMAIER and P. H. ROBERTS. Rotation and Magnetism of Earth’s Inner Core. *Science*, 274 :1887–1891, December 1996.
- G. A. GLATZMAIER and P.H. ROBERTS. Dynamo theory then and now. *International Journal of Engineering Science*, 36 :1325–1338, 1998.

- D. GUBBINS. Rotation of the Inner Core. *Journal of Geophysical Research*, 86 :11695–11699, 1981.
- D. GUBBINS, D. ALFÈ, G. MASTERS, G. D. PRICE, and M. J. GILLAN. Can the Earth’s dynamo run on heat alone? *Geophysical Journal International*, 155 :609–622, November 2003.
- D. GUBBINS, D. ALFÈ, G. MASTERS, G. D. PRICE, and M. GILLAN. Gross thermodynamics of two-component core convection. *Geophys. J. Int.*, 157 :1407–1414, 2004.
- D. GUBBINS, G. MASTERS, and F. NIMMO. A thermochemical boundary layer at the base of Earth’s outer core and independent estimate of core heat flux. *Geophys. J. Int.*, 174 :1007–1018, 2008.
- B. GUTENBERG. Über die Konstitution des Erdinnern, erschlossen aus Erdbebenbeobachtungen. *Physik. Zeitschr.*, 14 :1217, 1913.
- H. HAACK and E. R. D. SCOTT. Asteroid core crystallization by inward dendritic growth. *Journal of Geophysical Research*, 97 :14727–14734, September 1992.
- H. HAACK and E. R. D. SCOTT. Chemical fractionations in group IIIAB iron meteorites - Origin by dendritic crystallization of an asteroidal core. *Geochimica and Cosmochimica Acta*, 57 :3457–3472, 1993.
- H. HAACK, K. L. RASMUSSEN, and P. H. WARREN. Effects of regolith/megaregolith insulation on the cooling histories of differentiated asteroids. *Journal of Geophysical Research*, 95 :5111–5124, 1990.
- S. A. HAUCK, J. M. AURNOU, and A. J. DOMBARD. Sulfur’s impact on core evolution and magnetic field generation on Ganymede. *Journal of Geophysical Research (Planets)*, 111(10) :9008–+, 2006. doi : 10.1029/2005JE002557.
- J. W. HERNLUND, C. THOMAS, and P. J. TACKLEY. A doubling of the post-perovskite phase boundary and structure of the Earth’s lowermost mantle. *Nature*, 434 :882–886, April 2005.
- H. HUPPERT and M. A. HALLWORTH. Solidification of NH_4Cl and NH_4Br from aqueous solutions contaminated by CuSO_4 : the extinction of chimneys. *Journal of Crystal Growth*, 130 :495–506, June 1993.
- H. E. HUPPERT and M. G. WORSTER. Dynamic solidification of a binary melt. *Nature*, 314 :703–707, 1985.
- M. ISHII and A. M. DZIEWOŃSKI. The innermost inner core of the earth : Evidence for a change in anisotropic behavior at the radius of about 300 km. *Proceedings of the National Academy of Science*, 99 :14026–14030, 2002.
- M. ISHII and A. M. DZIEWOŃSKI. Distinct seismic anisotropy at the centre of the Earth. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 140 :203–217, November 2003.
- J.A. JACOBS. The Earth’s inner core. *Nature*, 172 :297, 1953.

- R. JEANLOZ and H.-R. WENK. Convection and anisotropy of the inner core. *Geophys. Res. Lett.*, 15 :72–75, 1988.
- H. JEFFREYS. The Rigidity of the Earth's Central Core. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 1 :371–383, June 1926.
- A. JEPHCOAT and P. OLSON. Is the inner core of the Earth pure iron ? *Nature*, 325 : 332–335, 1987.
- S.-I. KARATO. Inner Core Anisotropy Due to the Magnetic Field-Induced Preferred Orientation of Iron. *Science*, 262 :1708–1711, 1993.
- S.-I. KARATO. Seismic anisotropy of the Earth's inner core resulting from flow induced by Maxwell stresses. *Nature*, 402 :871–873, December 1999.
- S.-I. KARATO. Dynamics and anisotropy of the Earth's inner core. Importance of the magnetic coupling with the outer core. *Proc Jpn Acad Ser B*, 76 :1–6, 2000.
- B. L. N. KENNETT and E. R. ENGBAHL. Traveltimes for Global Earthquake Location and Phase Identification. *Geophysical Journal International*, 105 :429–465, 1991.
- B. L. N. KENNETT, E. R. ENGBAHL, and R. BULAND. Constraints on seismic velocities in the Earth from traveltimes. *Geophysical Journal International*, 122 :108–124, 1995.
- R. C. KERR, A. W. WOODS, M. G. WORSTER, and H. E. HUPPERT. Disequilibrium and macrosegregation during solidification of a binary melt. *Nature*, 340 :357–362, August 1989.
- R. C. KERR, A. W. WOODS, M. G. WORSTER, and H. E. HUPPERT. Solidification of an alloy cooled from above. Part 2. Non-equilibrium interfacial kinetics. *Journal of Fluid Mechanics*, 217 :331–348, 1990.
- D. W. KING, R. A. W. HADDON, and J. R. CLEARY. Array Analysis of Precursors to PKIKP in the Distance Range 128° to 142°. *Geophysical Journal International*, 37 : 157–173, April 1974.
- ERIC M. KING, STEPHAN STELLMACH, JEROME NOIR, ULRICH HANSEN, JONATHAN M. AURNOU, and JONATHAN M. AURNOU. Boundary layer control of rotating convection systems. *Nature*, 457 :301–304, 2009.
- E. KNITTLE and R. JEANLOZ. The high-pressure phase diagram of Fe(0.94)O - A possible constituent of the earth's core. *J. Geophys. Res.*, 96 :16169–80, 1991.
- D.K. KOPER and M.L. PYLE. Observations of PKiKP/PcP amplitude ratios and implications for Earth structure at the boundaries of the liquid core. *J. Geophys. Res.*, 109 :B03301, doi :10.1029/2003JB002750, 2004.
- S. LABROSSE. Thermal and magnetic evolution of the Earth's core. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 140 :127–143, 2003.
- S. LABROSSE, J.-P. POIRIER, and J.-L. LE MOUËL. The age of the inner core. *Earth planet. Sci. Lett.*, 190 :111–123, 2001.

- S. LABROSSE, J. W. HERNLUND, and N. COLTICE. A crystallizing dense magma ocean at the base of the Earth's mantle. *Nature*, 450 :866–869, December 2007.
- A. LAIO, S. BERNARD, G. L. CHIAROTTI, S. SCANDALO, and E. TOSATTI. Physics of Iron at Earth's Core Conditions. *Science*, 287 :1027, 2000.
- T. LAY, J. HERNLUND, E. J. GARNERO, and M. S. THORNE. A Post-Perovskite Lens and D" Heat Flux Beneath the Central Pacific. *Science*, 314 :1272–1276, November 2006.
- M. LE BARS and M.G. WORSTER. Interfacial conditions between a pure fluid and a porous medium : implications for binary alloy. *J. Fluid Mech.*, 550 :149–173, 2006.
- K. K. M. LEE and R. JEANLOZ. High-pressure alloying of potassium and iron : Radioactivity in the Earth's core? *Geophys. Res. Lett.*, 30(23) :230000–1, 2003.
- I. LEHMANN. P'. *Bureau Central Sismologique International*, 14 :87–115, 1936.
- F. LEYTON, K. D. KOPER, L. ZHU, and M. DOMBROVSKAYA. On the lack of seismic discontinuities within the inner core. *Geophysical Journal International*, 162 :779–786, September 2005.
- X. LI and V. F. CORMIER. Frequency-dependent seismic attenuation in the inner core, 1. A viscoelastic interpretation. *Journal of Geophysical Research (Solid Earth)*, 107 : 2361–+, December 2002.
- J.-F. LIN, D. L. HEINZ, A. J. CAMPBELL, J. M. DEVINE, and G. SHEN. Iron-Silicon Alloy in Earth's Core? *Science*, 295 :313–316, 2002.
- S. G. LITTON. Appendix to 'Solidification of NH₄Cl and NH₄Br from aqueous solutions contaminated by CuSO₄ : the extinction of chimneys' by H. Huppert and M.A. Hallworth. *Journal of Crystal Growth*, 130 :495–506, June 1993.
- D. E. LOPER. Structure of the inner core boundary. *Geophys. and Astrophys. Fluid Dyn.*, 25 :139–155, 1983.
- D.E. LOPER and P.H. ROBERTS. A study of conditions at the inner core boundary of the Earth. *Phys. Earth Planet. Inter.*, 24 :302–307, 1981.
- Y. MA, M. SOMAYAZULU, G. SHEN, H.-K. MAO, J. SHU, and R. J. HEMLEY. In situ X-ray diffraction studies of iron to Earth-core conditions. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 143 :455–467, 2004.
- H.-K. MAO, J. SHU, G. SHEN, R. J. HEMLEY, B. LI, and A. K. SINGH. Elasticity and rheology of iron above 220GPa and the nature of the Earth's inner core. *Nature*, 396 :741–743, December 1998.
- G. MASTERS and F. GILBERT. Structure of the inner core inferred from observations of its spheroidal shear modes. *Geophys. Res. Lett.*, 8 :569–571, 1981.
- W. F. McDONOUGH. Compositional Model for the Earth's Core. *Treatise on Geochemistry*, 2 :547–568, 2003.

- T. J. MCSWEENEY, K. C. CREAGER, and R. T. MERRILL. Depth extent of inner-core seismic anisotropy and implications for geomagnetism. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 101 :131–156, April 1997.
- S. MERKEL, J. SHU, P. GILLET, H.-K. MAO, and R. J. HEMLEY. X-ray diffraction study of the single-crystal elastic moduli of ϵ -Fe up to 30 GPa. *Journal of Geophysical Research (Solid Earth)*, 110(9) :5201–+, May 2005.
- M. MONNEREAU and D. A. YUEN. High-Pressure Geoscience Special Feature : Topology of the postperovskite phase transition and mantle dynamics. *Proceedings of the National Academy of Science*, 104 :9156–9161, 2007.
- A. MORELLI, A. M. DZIEWONSKI, and J. H. WOODHOUSE. Anisotropy of the inner core inferred from PKIKP travel times. *Geophys. Res. Lett.*, 13 :1545–1548, 1986.
- S. A. MORSE. Adcumulus growth of the inner core. *Geophys. Res. Lett.*, 13 :1466–1469, 1986.
- S. A. MORSE. Porous Sediments at the Top of Earth’s Core? *Science*, 291 :2092–2093, 2001.
- S. A. MORSE. No mushy zones in the Earth’s core. *Geochimica and Cosmochimica Acta*, 66 :2155–2165, 2002.
- W.W. MULLINS and R.F. SEKERKA. Stability of a planar interface during solidification of a dilute binary alloy. *J. Appl. Phys.*, 35 :444–451, 1963.
- V. R. MURTHY, W. VAN WESTRENEN, and Y. FEI. Experimental evidence that potassium is a substantial radioactive heat source in planetary cores. *Nature*, 423 :163–165, 2003.
- J. H. NGUYEN and N. C. HOLMES. Melting of iron at the physical conditions of the Earth’s core. *Nature*, 427 :339–342, 2004.
- F. NIMMO. *Energetics of the Core*. In *Treatise on Geophysics*, G. Schubert, Ed., Vol. 8, 2007.
- F. NIMMO, G. D. PRICE, J. BRODHOLT, and D. GUBBINS. The influence of potassium on core and geodynamo evolution. *Geophys. J. Int.*, 156 :363–376, 2004.
- F. L. NIU and L. X. WEN. Hemispherical variations in seismic velocity at the top of the Earth’s inner core. *Nature*, 410 :1081–1084, 2001.
- F. L. NIU and L. X. WEN. Seismic evidence for distinct anisotropy in the innermost inner core. *Nature Geoscience*, 1 :692–696, 2008.
- E. OHTANI, A. E. RINGWOOD, and W. HIBBERSON. Composition of the core, II. Effect of high pressure on solubility of FeO in molten iron. *Earth and Planetary Science Letters*, 71 :94–103, 1984.
- R. D. OLDHAM. The Constitution of the Interior of the Earth as Revealed by Earthquakes. *Quaternary Journal of Geological Society of London*, 62 :456, 1906.

- H. S. C. O'NEILL, D. CANIL, and D. C. RUBIE. Oxide-metal equilibria to 2500°C and 25 GPa : Implications for core formation and the light component in the Earth's core. *J. Geophys. Res.*, 103 :12239–12260, 1998.
- A. OUZOUNIS and K.C. CREAGER. Isotropy overlying anisotropy at the top of the inner core. *Geophys. Res. Lett.*, 28 :4331–4334, 2001.
- H. PALME and H. S. C. O'NEILL. Cosmochemical Estimates of Mantle Composition. *Treatise on Geochemistry*, 2 :1–38, December 2003.
- Z. PENG, K.D. KOPER, J.E. VIDALE, F. LEYTON, and P. SHEARER. Inner-core fine-scale structure from scattered waves recorded by LASA. *Journal of Geophysical Research (Solid Earth)*, 113 :9312–9323, 2008.
- J.-P. POIRIER. Physical properties of the Earth's core. *C.R. Acad. Sci. Paris*, 318 : 341–350, 1994.
- J.-P. POIRIER. *Introduction to the Physics of the Earth's Interior*. pp. 326. ISBN 052166313X. Cambridge, UK : Cambridge University Press., 2000.
- J. P. POIRIER and G. D. PRICE. Primary slip system of ϵ -iron and anisotropy of the Earth's inner core. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 110 :147–156, 1999.
- J.-P. POIRIER and T. J. SHANKLAND. Dislocation melting of iron and the temperature of the inner core boundary, revisited. *Geophysical Journal International*, 115 :147–151, 1993.
- G. POUPINET and B. L. N. KENNETT. On the observation of high frequency PKiKP and its coda in Australia. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 146 :497–511, 2004.
- G. POUPINET, R. PILLET, and A. SOURIAU. Possible heterogeneity of the earth's core deduced from PKIKP travel times. *Nature*, 305 :204–206, September 1983.
- G. POUPINET, A. SOURIAU, and O. COUTANT. The existence of an inner core super-rotation questioned by teleseismic doublets. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 118 :77–88, 2000.
- B. ROMANOWICZ and L. BRÉGER. Anomalous splitting of free oscillations : A reevaluation of possible interpretations. *Journal of Geophysical Research*, 105 :21559–21578, 2000.
- D. C. RUBIE, GESSMANN C. K., and D. J. FROST. Partitioning of oxygen during core formation on the Earth and Mars. *Nature*, 429 :58–61, 2004.
- D.C. RUBIE, F. NIMMO, and H.J. MELOSH. *Formation of Earth's core*. In *Treatise on Geophysics*, G. Schubert, Ed., Vol. 9, 2007.
- S. K. SAXENA and L. S. DUBROVINSKY. Iron phases at high pressures and temperatures : phase transition and melting. *Am. Mineral.*, 85 :372–375, 2000.
- S. K. SAXENA, G. SHEN, and P. LAZOR. Experimental evidence for a new iron phase and implications for Earth's core. *Science*, 260 :1312–1314, 1993.

- P. M. SHEARER. Constraints on inner core anisotropy from PKP(DF) travel times. *Journal of Geophysical Research*, 99 :19647–+, 1994.
- P. M. SHEARER, K. M. TOY, and J. A. ORCUTT. Axi-symmetric earth models and inner-core anisotropy. *Nature*, 333 :228–232, May 1988.
- G. SHEN, H.-K. MAO, R. J. HEMLEY, T. S. DUFFY, and M. L. RIVERS. Melting and crystal structure of iron at high pressures and temperatures. *Geophys. Res. Lett.*, 25 : 373–376, 1998.
- H. SHIMIZU, J.-P. POIRIER, and J.-L. LE MOUËL. On crystallization at the inner core boundary. *Phys. Earth Planet. Inter.*, 151 :37–51, 2005.
- S. C. SINGH, M. A. J. TAYLOR, and J. P. MONTAGNER. On the Presence of Liquid in Earth's Inner Core. *Science*, 287 :2471–2474, 2000.
- P. SÖDERLIND, J. A. MORIARTY, and J. M. WILLS. First-principles theory of iron up to earth-core pressures : Structural, vibrational, and elastic properties. *Physical Review B*, 53 :14063–14072, June 1996.
- X. SONG. Anisotropy of the Earth's inner core. *Reviews of Geophysics*, 35 :297–313, August 1997.
- X. SONG and W. DAI. Topography of Earth's inner core boundary from high-quality waveform doublets. *Geophysical Journal International*, 175 :386–399, October 2008.
- X. SONG and D. V. HELMBERGER. Anisotropy of Earth's inner core. *Geophys. Res. Lett.*, 20 :2591–2594, 1993.
- X. SONG and D. V. HELMBERGER. Depth dependence of anisotropy of Earth's inner core. *Journal of Geophysical Research*, 100 :9805–9816, 1995a.
- X. SONG and D. V. HELMBERGER. A P wave velocity model of Earth's core. *Journal of Geophysical Research*, 100 :9817–9830, June 1995b.
- X. SONG and P. G. RICHARDS. Seismological evidence for differential rotation of the Earth's inner core. *Nature*, 382 :221–224, 1996.
- X. SONG and X. XU. Inner core transition zone and anomalous PKP(DF) waveforms from polar paths. *Geophysical Research Letters*, 29(4), February 2002.
- A. SOURIAU. *The Earth's cores*. In *Treatise on Geophysics*, G. Schubert, Ed., Vol. 1, 2007.
- A. SOURIAU and G. POUPINET. The velocity profile at the base of the liquid core from PKP(BC+Cdiff) data : An argument in favor of radial inhomogeneity. *Geophys. Res. Lett.*, 18 :2023–2026, 1991.
- A. SOURIAU and B. ROMANOWICZ. Anisotropy in inner core attenuation : a new type of data to constrain the nature of the solid core. *Geophys. Res. Lett.*, 23 :1–4, 1996.
- A. SOURIAU and B. ROMANOWICZ. Anisotropy in the inner core : relation between P-velocity and attenuation. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 101 :33–47, April 1997.

- A. SOURIAU and P. ROUDIL. Attenuation in the uppermost inner core from broad-band GEOSCOPE PKP data. *Geophysical Journal International*, 123 :572–587, November 1995.
- A. SOURIAU and M. SOURIAU. Ellipticity and density at the inner core boundary from subcritical PKiKP and PcP data. *Geophysical Journal International*, 98 :39–54, July 1989.
- A. SOURIAU, P. ROUDIL, and B. MOYNOT. Inner core differential rotation : Facts and artefacts. *Geophys. Res. Lett.*, 24 :2103–2106, 1997.
- F. D. STACEY. *Physics of the earth*. 3rd edn., Brooksfield Press, Queensland, 1992.
- F. D. STACEY. Theory of thermal and elastic properties of the lower mantle and core. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 89 :219–245, 1995.
- F. D. STACEY and O. L. ANDERSON. Electrical and thermal conductivities of Fe-Ni-Si alloy under core conditions. *Phys. Earth Planet. Inter.*, 124 :153–162, 2001.
- G. STEINLE-NEUMANN, L. STIXRUDE, R. E. COHEN, and O. GÜLSEREN. Elasticity of iron at the temperature of the Earth’s inner core. *Nature*, 413 :57–60, September 2001.
- D. J. STEVENSON. Inner Core Anisotropy. *Eos Trans. AGU*, 77(46), Fall Meet. Suppl. : F41, 1996.
- D. J. STEVENSON. A planetary perspective on the deep Earth. *Nature*, 451 :261–265, 2008.
- A. J. STEWART, M. W. SCHMIDT, W. VAN WESTRENEN, and C. LIEBSKE. Mars : A New Core-Crystallization Regime. *Science*, 316 :1323–, 2007. doi : 10.1126/science.1140549.
- L. STIXRUDE and R. E. COHEN. High-Pressure Elasticity of Iron and Anisotropy of Earth’s Inner Core. *Science*, 267 :1972–1975, March 1995.
- L. STIXRUDE, E. WASSERMAN, and R. E. COHEN. Composition and temperature of Earth’s inner core. *J. Geophys. Res.*, 102 :24729–24740, 1997.
- W.-J. SU and A. M. DZIEWONSKI. Inner core anisotropy in three dimensions. *J. Geophys. Res.*, 100 :9831–9852, 1995.
- W.-J. SU, A. M. DZIEWONSKI, and R. JEANLOZ. Planet Within a Planet : Rotation of the Inner Core of Earth. *Science*, 274 :1883–1887, 1996.
- I. SUMITA and P. OLSON. A Laboratory Model for Convection in Earth’s Core Driven by a Thermally Heterogeneous Mantle. *Science*, 286 :1547–1549, 1999.
- I. SUMITA and P. OLSON. Rotating thermal convection experiments in a hemispherical shell with heterogeneous boundary heat flux : Implications for the Earth’s core. *Journal of Geophysical Research (Solid Earth)*, 107 :2169–+, August 2002.

- I SUMITA, S YOSHIDA, M KUMAZAWA, and Y HAMANO. A model for sedimentary compaction of a viscous media and its application to inner-core growth. *Geophys. J. Int.*, 124 :302–324, 1996.
- X. SUN and X. SONG. The inner inner core of the Earth : Texturing of iron crystals from three-dimensional seismic anisotropy. *Earth and Planetary Science Letters*, 269 : 56–65, May 2008a.
- X. SUN and X. SONG. Tomographic inversion for three-dimensional anisotropy of Earth’s inner core. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 167 :53–70, March 2008b.
- S. TAIT and C. JAUPART. Compositional convection in a reactive crystalline mush and melt differentiation. *Journal of Geophysical Research*, 97 :6735–6756, 1992.
- S. TAIT, K. JAHRLING, and C. JAUPART. The planform of compositional convection and chimney formation in a mushy layer. *Nature*, 359 :406–408, 1992.
- S. TANAKA and H. HAMAGUCHI. Degree one heterogeneity and hemispherical variation of anisotropy in the inner core from PKP(BC)-PKP(DF) times. *Journal of Geophysical Research*, 102 :2925–2938, February 1997.
- J. TROMP. Support for anisotropy of the Earth’s inner core from free oscillations. *Nature*, 366 :678–681, 1993.
- J. S. TURNER. *Buoyancy Effects in Fluids*. Cambridge University Press., 1980.
- F. ULFF-MOLLER. Effects of liquid immiscibility on trace element fractionation in magmatic iron meteorites : A case study of group IIIAB. *Meteoritics and Planetary Science*, 33 :207–220, 1998.
- R. D. VAN DER HILST, M. V. DE HOOP, P. WANG, S.-H. SHIM, P. MA, and L. TENORIO. Seismostratigraphy and Thermal Structure of Earth’s Core-Mantle Boundary Region. *Science*, 315 :1813–, March 2007.
- J. A. VAN ORMAN. On the viscosity and creep mechanism of Earth’s inner core. *Geophysical Research Letters*, 31 :20606–+, 2004.
- J. VERHOOGEN. *Energetics of the Earth*. National Academy of Sciences, Washington, D.C., 1980.
- J. E. VIDALE and P. S. EARLE. Fine-scale heterogeneity in the Earth’s inner core. *Nature*, 404 :273–275, 2000.
- J. E. VIDALE, D. A. DODGE, and P. S. EARLE. Slow differential rotation of the Earth’s inner core indicated by temporal changes in scattering. *Nature*, 405 :445–448, 2000.
- L. VOČADLO. Ab initio calculations of the elasticity of iron and iron alloys at inner core conditions : Evidence for a partially molten inner core? *Earth and Planetary Science Letters*, 254 :227–232, 2007.
- L. VOČADLO, D. ALFÈ, M. J. GILLAN, I.G. WOOD, J.P. BRODHOLT, and G. D. PRICE. Possible thermal and chemical stabilization of body-centred-cubic iron in the Earth’s core. *Nature*, 424 :536–539, 2003.

- J. WADE and B. J. WOOD. Core formation and the oxidation state of the Earth. *Earth and Planetary Science Letters*, 236 :78–95, 2005.
- J. T. WASSON. Trapped melt in IIIAB irons : Solid/Liquid elemental partitioning during the fractionation of the IIIAB magma. *Geochimica and Cosmochimica Acta*, 63 : 2875–2889, 1999.
- P. WEBER and P. MACHETEL. Convection within the inner-core and thermal implications. *Geophys. Res. Lett.*, 19 :2107–2110, 1992.
- L. WEN. Localized temporal changes of the Earth’s inner core boundary. *Science*, 314 : 967–970, 2006.
- H. R. WENK, T. TAKESHITA, R. JEANLOZ, and G. C. JOHNSON. Development of texture and elastic anisotropy during deformation of hcp metals. *Geophys. Res. Lett.*, 15 :76–79, 1988.
- H.-R. WENK, J. R. BAUMGARDNER, R. A. LEBENSOHN, and C. N. TOMÉ. A convection model to explain anisotropy of the inner core. *Journal of Geophysical Research*, 105 :5663–5678, 2000a.
- H.-R. WENK, S. MATTHIES, R. J. HEMLEY, H.-K. MAO, and J. SHU. The plastic deformation of iron at pressures of the Earth’s inner core. *Nature*, 405 :1044–1047, June 2000b.
- J. S. WETTLAUER, M. GRAE WORSTER, and H. E. HUPPERT. Natural convection during solidification of an alloy from above with application to the evolution of sea ice. *Journal of Fluid Mechanics*, 344 :291–316, August 1997.
- K. T. WHEELER, D. WALKER, Y. FEI, W. G. MINARIK, and W. F. McDONOUGH. Experimental partitioning of uranium between liquid iron sulfide and liquid silicate : Implications for radioactivity in the Earth’s core. *Geochimica and Cosmochimica Acta*, 70 :1537–1547, March 2006.
- Q. WILLIAMS, R. JEANLOZ, J. BASS, B. SVENDSEN, and T. J. AHRENS. The melting curve of iron to 250 gigapascals - A constraint on the temperature at earth’s center. *Science*, 236 :181–+, 1987.
- B. J. WOOD, M. J. WALTER, and J. WADE. Accretion of the Earth and segregation of its core. *Nature*, 441 :825–833, 2006.
- J. H. WOODHOUSE, D. GIARDINI, and X.-D. LI. Evidence for inner core anisotropy from free oscillations. *Geophys. Res. Lett.*, 13 :1549–1552, 1986.
- A. W. WOODS and H. E. HUPPERT. The growth of compositionally stratified solid above a horizontal boundary. *Journal of Fluid Mechanics*, 199 :29–53, 1989.
- J. WOOKEY and G. HELFFRICH. Inner-core shear-wave anisotropy and texture from an observation of PKJKP waves. *Nature*, 454 :873–876, 2008.
- M. G. WORSTER. Instabilities of the liquid and mushy regions during solidification of alloys. *Journal of Fluid Mechanics*, 237 :649–669, 1992.

- M. G. WORSTER. Convection in Mushy Layers. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 29 :91–122, 1997.
- M. G. WORSTER. *Solidification of fluids*. Perspectives in Fluid Dynamics, Edited by G. K. Batchelor and H. K. Moffatt and M. G. Worster, pp. 644. ISBN 0521531691. Cambridge, UK : Cambridge University Press, December 2002., 2002.
- M. G. WORSTER and R. C. KERR. The transient behaviour of alloys solidified from below prior to the formation of chimneys. *Journal of Fluid Mechanics*, 269 :23–44, 1994.
- C. S. YOO, N. C. HOLMES, M. ROSS, D. J. WEBB, and C. PIKE. Shock temperatures and melting of iron at earth core conditions. *Phys. Rev. Lett.*, 70(25) :3931–3934, 1993.
- S. YOSHIDA, I. SUMITA, and M. KUMAZAWA. Growth model of the inner core coupled with the outer core dynamics and the resulting elastic anisotropy. *J. Geophys. Res.*, 101 :28085–28104, 1996.
- T. YUKUTAKE. Implausibility of thermal convection in the Earth’s solid inner core. *Phys. Earth Planet. Inter.*, 108 :1–13, 1998.
- J. ZHANG, X. SONG, Y. LI, P. G. RICHARDS, X. SUN, and F. WALDHAUSER. Inner Core Differential Motion Confirmed by Earthquake Waveform Doublets. *Science*, 309 : 1357–1360, August 2005.

Annexes

Author's personal copy



ELSEVIER

Available online at www.sciencedirect.com

Physics of the Earth and Planetary Interiors 164 (2007) 36–49

 PHYSICS
OF THE EARTH
AND PLANETARY
INTERIORS

www.elsevier.com/locate/pepi

On the existence and structure of a mush at the inner core boundary of the Earth

R. Deguen*, T. Alboussière, D. Brito

Laboratoire de Géophysique Interne et Tectonophysique, Université Joseph Fourier, Grenoble, France

Received 17 December 2006; received in revised form 10 May 2007; accepted 11 May 2007

Abstract

It has been suggested about 20 years ago that the liquid close to the inner core boundary (ICB) is supercooled and that a sizable mushy layer has developed during the growth of the inner core. The morphological instability of the liquid–solid interface which usually results in the formation of a mushy zone has been intensively studied in metallurgy, but the freezing of the inner core occurs in very unusual conditions: the growth rate is very small, and the pressure gradient has a key role, the newly formed solid being hotter than the adjacent liquid.

We investigate the linear stability of a solidification front under such conditions, pointing out the destabilizing role of the thermal and solutal fields, and the stabilizing role of the pressure gradient. The main consequence of the very small solidification rate is the importance of advective transport of solute in liquid, which tends to remove light solute from the vicinity of the ICB and to suppress supercooling, thus acting against the destabilization of the solidification front. For plausible phase diagrams of the core mixture, we nevertheless found that the ICB is likely to be morphologically unstable, and that a mushy zone might have developed at the ICB. The thermodynamic thickness of the resulting mushy zone can be significant, from ~ 100 km to the entire inner core radius, depending on the phase diagram of the core mixture. However, such a thick mushy zone is predicted to collapse under its own weight, on a much smaller length scale ($\lesssim 1$ km). We estimate that the interdendritic spacing is probably smaller than a few tens of meter, and possibly only a few meters.

© 2007 Elsevier B.V. All rights reserved.

Keywords: Inner core boundary; Morphological instability; Mushy zone; Compaction; Interdendritic spacing

1. Introduction

As the Earth's core is gradually cooling down, the inner core is freezing from the liquid core mixture (Jacobs, 1953) thought to be mostly iron-nickel alloyed with a small quantity of lighter elements. Although the nature and relative abundances of these light elements are still controversial (Poirier, 1994a), mineralogical models consistent with the seismological constraints indicate

that their concentration is greater, perhaps by a factor 4, in the liquid core than in the inner core (Anderson and Ahrens, 1994): like most alloys, the core mixture is fractionating during the process of crystallization, the liquid core being slowly enriched in light elements.

The release of light elements which results from the gradual solidification of the core is thought to be a major source of buoyancy for driving the core convection and the geodynamo (Braginsky, 1963; Gubbins et al., 2004), but segregation of light solute may also have dramatic consequences on the structure of the solid inner core itself (Fearn et al., 1981). It is well known from metallurgical experiments that solute segregation during

* Corresponding author.

E-mail address: renaud.deguen@obs.ujf-grenoble.fr (R. Deguen).

solidification can result in the supercooling of the liquid close to the solidification front. This supercooling is usually suppressed by either solidification of isolated crystals in a slurry layer, or by the development of a mushy zone, where solid cells or dendrites coexist with a solute rich liquid (e.g., Kurz and Fisher, 1989).

Loper and Roberts (1981) and Fearn et al. (1981) show that the conditions at the inner core boundary (ICB) are almost certainly favorable to the formation of either a slurry layer or a mushy layer. Fearn et al. (1981) gave preference to the latter and concluded that a mushy zone of considerable depth, possibly extending to the inner core center, must have developed at the ICB. More recently, Shimizu et al. (2005) quantitatively studied the possible regimes of solidification (slurry layer or mushy zone) and found that a dendritic regime is more probable than a slurry layer regime, because of the difficulty to supply enough nuclei to feed a slurry layer. Some seismological studies (e.g., Cao and Romanowicz, 2004) also argue in favor of the existence of a mushy zone at the top of the inner core.

Morse (1986, 2002) challenged this view arguing that convective motion should quantitatively remove light solute from the inner core boundary, thus suppressing supercooling. From an analogy between the growth of the inner core and cumulate solidification in magma chambers, Morse (2002) concluded that the ICB must be microscopically flat, and rejected the idea of a mushy zone at the top of the inner core. Cumulates and dendritic layers have dynamics similar in many respects, both being reactive porous media, but their development occurs through two physically different processes. Cumulates form by sedimentation of early formed crystals from the melt, the possible porosity resulting from a competition between sedimentation of crystals and solidification in the layer. In contrast, a dendritic layer develops as a consequence of an instability of an initially plane solid–liquid interface. Whether Morse's analysis is appropriate or not to the formation of a dendritic layer may therefore be questionable, but it is probably correct that advective transport of solute may affect the solidification regime of the ICB.

The morphological stability of a solidification front has been intensively studied both theoretically and experimentally (e.g., Mullins and Sekerka, 1963; Kurz and Fisher, 1989; Davis, 2001) but, as noted by Shimizu et al. (2005), the freezing of the inner core occurs in very unusual conditions: the growth rate is very small, about 6 orders of magnitude smaller than in typical laboratory experiments, and the pressure gradient has a key role, the newly formed solid being hotter than the adjacent liquid.

In this work, we will take into account first order effects of advective transport and investigate possible effects of the very slow solidification rate and of the pressure gradient on the stability of a solidification front (Sections 2–4). In Section 5, the thermophysical parameters and conditions relative to the crystallization of the inner core will be evaluated from a survey of the literature and from the use of thermodynamic constraints. The stability of the ICB will then be discussed and we shall argue that the existence of a mushy zone is very likely. Finally, in Section 6, we will estimate various length scales relevant to the structure of a mushy inner core, such as its depth and interdendritic spacing.

2. Supercooling in the vicinity of an interface

When a dilute alloy is frozen from the melt, the newly formed solid usually differs in composition from the liquid, in a way which depends on the solubility of the solute in the solid and liquid phases. This solute redistribution is conveniently described by the distribution coefficient $k = c^s/c$, where c^s and c are, respectively, the mass fractions of solute in the solid and in the liquid. In the common case where $k < 1$, solidification results in the rejection of solute from the solid phase, the liquid phase being enriched in solute in the vicinity of the solidification front.

As the melting temperature is lowered by the presence of solute, the liquidus temperature at the interface is lower than that of the liquid ahead of the interface, which is richer in solute. If the actual temperature gradient at the solidification front is smaller than the gradient of the melting temperature, the temperature of the liquid close to the interface is smaller than the liquidus temperature, i.e., the liquid is supercooled. This non-equilibrium state usually does not persist and results in the formation of either a mushy zone, through a destabilization of the solidification front, or a slurry layer.

Denoting T^ℓ and T_m the temperature in the liquid and the melting temperature, respectively, the criterion for supercooling is:

$$\left. \frac{dT^\ell}{dz} \right|_0 < \left. \frac{dT_m}{dz} \right|_0 \quad (1)$$

where the subscript 0 denotes the value at the solid–liquid interface, and where the z axis points toward the liquid. In the core, the melting temperature depends on both the solute concentration c and the pressure P . Defining the liquidus and Clapeyron slopes as:

$$m_c = \left. \frac{\partial T_m}{\partial c} \right|_P < 0 \quad \text{and} \quad m_P = \left. \frac{\partial T_m}{\partial P} \right|_c > 0, \quad (2)$$

the supercooling criterion can be written:

$$G_T^\ell - m_P G_P < m_C G_C \quad (3)$$

where $G_T^\ell = dT^\ell/dz|_0$, $G_C = dc/dz|_0$ and $G_P = dP/dz|_0$ are, respectively, the thermal, chemical and pressure gradients at the solid–liquid interface. In the solidification conditions of the core, the pressure gradient is negative and m_P positive (e.g., [Boehler, 1993](#)), thus $m_P G_P$ is negative and the pressure field acts against supercooling. In contrast, the temperature and concentration fields both promote supercooling, as $G_T^\ell < 0$ and $m_C G_C > 0$. We can therefore predict that the pressure field should have a stabilizing effect on the solidification front whereas temperature and solutal fields should be destabilizing.

3. The effect of advective transport on the supercooling criterion

If motion is present in the liquid, advective transport of solute, and, to a smaller extent, of heat, may affect the solutal and thermal profiles near the solid–liquid boundary, and thus the degree of supercooling. In this section, we consider the effects of buoyancy-driven convection on the mean solute and thermal fields. Let us consider the directional solidification of a dilute binary alloy at constant velocity V . The solute has a concentration c_∞ in the bulk of the liquid and a chemical diffusivity D_c in the liquid. The coordinate system is fixed on the moving front, the z axis pointing toward the liquid perpendicularly to the solidification front. The liquid has a velocity \mathbf{u} .

In the melt, the solute concentration c is given by the equation of conservation in the bulk:

$$-V \frac{\partial c}{\partial z} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)c = D_c \nabla^2 c, \quad (4a)$$

with boundary conditions at infinity:

$$c \rightarrow c_\infty \quad \text{at} \quad z \rightarrow \infty, \quad (4b)$$

and at the interface $z = 0$, given by the equation of conservation of solute at the solidification front:

$$G_C = (c_0^s - c_0) \frac{V}{D_c} = c_0(k-1) \frac{V}{D_c}, \quad (4c)$$

where c_0^s and c_0 are the concentration in the solid and liquid phases at the interface. If advective transport is negligible, a solute boundary layer of thickness $\delta_c = D_c/V$ will build up, and after a transient stage during which the solute concentration in the solid at the solidification front gradually increases from kc_∞ to c_∞ , the

system reaches a steady state where the concentration of solute $c(z)$ in the liquid is

$$c(z) = c_\infty + c_\infty \frac{1-k}{k} \exp\left(-\frac{z}{\delta_c}\right) \quad (5)$$

(e.g., [Kurz and Fisher, 1989](#); [Davis, 2001](#)). The concentration in the liquid at the interface is $c_0 = c_\infty/k$ and the chemical gradient at the interface is

$$G_C = c_\infty \frac{k-1}{k} \frac{V}{D_c}. \quad (6)$$

However, if the solidification is very slow, as it is at the ICB, advection may affect strongly the concentration gradient at the interface. With a solidification velocity of $10^{-11} \text{ m s}^{-1}$ and a chemical diffusivity of order $10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$, the chemical diffusive boundary layer thickness is $\delta_c = D_c/V \sim 100 \text{ m}$. Defining the solutal Rayleigh number Ra^s as:

$$Ra^s = \frac{\beta g G_C \delta_c^4}{\nu D_c}, \quad (7)$$

where $\beta \sim 1$ ([Gubbins et al., 2004](#)) is the compositional expansion coefficient, $g = 4.4 \text{ m s}^{-2}$ is the magnitude of gravity at the ICB ([Dziewonski and Anderson, 1981](#)) and $\nu \sim 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ is the kinematic viscosity of the liquid, we found $Ra^s \sim 10^{21}$. This is much larger than the critical Rayleigh number for the Rayleigh–Taylor instability. The purely diffusive boundary layer is therefore subject to convective instabilities, which remove light solute from the vicinity of the interface much more efficiently than diffusion alone.

The purely diffusive concentration profile described by Eq. (5) is therefore not relevant to the case of the Earth's inner core solidification, and effects of advective solute transport on the mean concentration profile must be investigated. In the case of purely diffusive solute transport, c_0 is equal to c_∞/k . This is the maximum allowed value as a greater value will imply a solute concentration in the solid greater than c_∞ . If convective motions are present, advective transport results in the depletion of solute close to the solidification front, and the concentration in the liquid at the boundary will be closer to c_∞ as convection is more vigorous, whereas concentration in the solid will tend to kc_∞ . Because solute conservation implies that the concentration in the solid cannot exceed c_∞ and must be greater than kc_∞ , the concentration gradient G_C at the interface is bounded by:

$$c_\infty(k-1) \frac{V}{D_c} \leq G_C \leq c_\infty \frac{k-1}{k} \frac{V}{D_c}, \quad (8)$$

the upper bound being the value of the chemical gradient in the purely diffusive case. This gradient tends toward its lower bound as the efficiency of advective transport is enhanced; in what follows, we will consider that the actual chemical gradient can be approximated by its lower bound:

$$G_c \simeq c_\infty(k-1) \frac{V}{D_c}, \quad (9)$$

which should be compared with Eq. (6). If k is small, the convective chemical gradient can be considerably smaller than the diffusive gradient.

With a no-slip boundary condition, $\mathbf{u}(x, y, 0) = 0$ for all (x, y) , Eq. (4a) taken at $z = 0$ gives the second derivative of the mean concentration profile at the interface:

$$\left. \frac{d^2 c}{dz^2} \right|_0 = - \frac{V}{D_c} \left. \frac{dc}{dz} \right|_0 = - \frac{1}{\delta_c} G_c. \quad (10)$$

In what follows, the vertical variations of the mean concentration field in the vicinity of the interface will be described by a second order Taylor expansion:

$$c(z) = c_0 + G_c z - G_c \frac{1}{\delta_c} \frac{z^2}{2}. \quad (11)$$

Because the thermal diffusivity is much larger than the solute diffusivity D_c , advection affects the solute flow much more strongly than the thermal flow, and we will ignore the effects of advection on the thermal field, i.e., the mean temperature is solution of the equation of diffusion in the liquid and in the solid:

$$-V \frac{\partial T^\ell}{\partial z} = D_T^\ell \nabla^2 T^\ell, \quad (12)$$

$$-V \frac{\partial T^s}{\partial z} = D_T^s \nabla^2 T^s, \quad (13)$$

where D_T^ℓ and D_T^s are the thermal diffusivities in the liquid and solid, respectively. The thermal gradient at the interface is given by the heat balance at the solid–liquid interface:

$$L_v V = \kappa^s G_T^s - \kappa^\ell G_T^\ell, \quad (14)$$

where L_v is latent heat per unit volume, κ^s and κ^ℓ the thermal conductivities in the solid and liquid, respectively, and G_T^s and G_T^ℓ are the gradient of temperature at the interface in the solid and liquid, respectively. The temperature field can be expanded as

$$T(z) = T_0 + G_T^\ell z - G_T^\ell \frac{1}{\delta_T} \frac{z^2}{2}, \quad (15)$$

where $\delta_T = D_T/V$.

Shimizu et al. (2005) did not take into account effects of convection on the thickness of the boundary layer, and assumed it to be given by the diffusive boundary layer thickness $\delta_c = D_c/V$. They study the possibility that a fraction of the solidification occurs in the supercooled zone, whose thickness has been taken to be the diffusive boundary layer thickness, that is ~ 100 m. With this value, they found that it is unlikely that a significant fraction of the solidification occurs in a slurry layer, because of the difficulty of supplying continuously enough nuclei. Taking into account advective transport leads to a much thinner supercooled zone, with smaller supercooling, where the amount of crystals solidified is probably much smaller than expected from the model of Shimizu et al. (2005). We will therefore consider that all the solidification occurs at the solid–liquid interface, and that growth of crystals in the supercooled zone is negligible.

4. Linear stability analysis of the growth interface of a binary alloy in a pressure gradient

4.1. Solutal and thermal instabilities

Considerations of Section 3 allow us to determine a mean state for the solute and thermal fields, hereafter noted \bar{c} and \bar{T} , respectively, described by Eqs. (11) and (15); the pressure field is taken to be hydrostatic, the pressure gradient being $G_p^\ell = -\rho^\ell g$.

In this section we consider the stability of the planar interface against infinitesimal perturbations of the mean fields. The interface is not planar anymore, but has an infinitesimal topography $h(x, y, t)$ which temporal evolution we study. The solute and thermal fields can be expressed as the sum of the mean field and infinitesimal disturbances: $c(x, y, z, t) = \bar{c}(z) + \tilde{c}(x, y, z, t)$ and $T(x, y, z, t) = \bar{T}(z) + \tilde{T}(x, y, z, t)$. The linear stability analysis we propose here is similar in principle to Mullins and Sekerka's analysis (Mullins and Sekerka, 1963). The two main differences concern the formulation of the basic state, which is considered here to be altered by convective motions, and the dependence of the melting temperature on pressure.

The thermal and solutal fields must satisfy:

- (i) the equations of conservation of solute and heat in the liquid and solid phases:

$$\frac{\partial c}{\partial t} - V \frac{\partial c}{\partial z} = D_c \nabla^2 c, \quad (16a)$$

$$\frac{\partial T^\ell}{\partial t} - V \frac{\partial T^\ell}{\partial z} = D_T^\ell \nabla^2 T^\ell, \quad (16b)$$

$$\frac{\partial T^s}{\partial t} - V \frac{\partial T^s}{\partial z} = D_T^s \nabla^2 T^s. \quad (16c)$$

Diffusion of solute in the solid is neglected.

- (ii) the boundary conditions at the interface. At thermodynamic equilibrium, the temperature at the interface T^I must obey the Gibbs-Thomson relation:

$$T^I = T_m + \Gamma H + m_P G_P h + m_c c, \quad (16d)$$

which states that the temperature at the interface is equal to the melting temperature of the curved interface, when variations with pressure, concentration and interface curvature are taken into account. T_m is the solvent melting temperature of a flat interface

$$\omega = \frac{\alpha m_c G_c - \alpha^\ell G_T^\ell - \alpha^s G_T^s + m_P G_P - \Gamma k_h^2}{(L_v/(\kappa^s \beta^s - \kappa^\ell \beta^\ell)) - ((D_c/V^2)/(\beta D_c/V + 1 - k))m_c G_c}, \quad (18)$$

at $z = 0$, $H \simeq \nabla^2 h$ is the interface curvature and $\Gamma = T_m \gamma / L_v$ is the Gibbs coefficient, where γ is the liquid–solid interfacial energy.

In addition, the thermal and solutal fields must, respectively, satisfy the heat balance and the solute conservation at the interface:

$$L_v v_n(x, y) = (\kappa^s \nabla T^s - \kappa^\ell \nabla T^\ell) \cdot \mathbf{n}(x, y), \quad (16e)$$

$$(c^s - c)v_n(x, y) = D_c \nabla c \cdot \mathbf{n}(x, y), \quad (16f)$$

where $v_n(x, y) \simeq V + \partial h / \partial t$ is the speed of the front and \mathbf{n} is the unit normal vector pointing toward the liquid.

- (iii) boundary conditions at infinity: the perturbations must decay to zero at infinity (but see discussion below).

Eq. (16) lead to a system in perturbation quantities h , \tilde{c} , \tilde{T}^ℓ and \tilde{T}^s which is linearized, allowing to seek solutions for the perturbed fields under the following normal mode form:

$$\begin{pmatrix} h \\ \tilde{c} \\ \tilde{T}^\ell \\ \tilde{T}^s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h_1 \\ c_1(z) \\ T_1^\ell(z) \\ T_1^s(z) \end{pmatrix} \exp(\omega t + ik_x x + ik_y y) \quad (17)$$

where ω is the growth rate of the disturbance and k_x and k_y are the wave numbers along the interface in the direction x and y . From Eqs. (16a–(16c) and the boundary condition (iii), $c_1(z)$, $T_1^\ell(z)$ and $T_1^s(z)$ are found to be proportional to $\exp(\beta z)$, $\exp(\beta^\ell z)$ and $\exp(\beta^s z)$, respectively, where β , β^ℓ and β^s are

$$\beta^s = -\frac{1}{2} \frac{V}{D_T^s} \left[1 - \sqrt{1 + 4 \left(\frac{D_T^s k_h}{V} \right)^2} \right] \geq 0,$$

$$\beta^\ell = -\frac{1}{2} \frac{V}{D_T^\ell} \left[1 + \sqrt{1 + 4 \left(\frac{D_T^\ell k_h}{V} \right)^2} \right] \leq -\frac{V}{D_T^\ell},$$

$$\beta = -\frac{1}{2} \frac{V}{D_c} \left[1 + \sqrt{1 + 4 \left(\frac{D_c k_h}{V} \right)^2} \right] \leq -\frac{V}{D_c}.$$

Using expression (17) in the perturbation equations leads to a set of homogeneous, linear equations in h_1 , c_1 , T_1^ℓ and T_1^s which have nontrivial solutions if the following dispersion equation is satisfied:

where:

$$k_h = \sqrt{k_x^2 + k_y^2},$$

$$\alpha^\ell = \frac{\kappa^\ell \beta^\ell + \kappa^\ell V / D_T^\ell}{\kappa^\ell \beta^\ell - \kappa^s \beta^s} \in \left[0, \frac{\kappa^\ell}{\kappa^\ell + \kappa^s} \right],$$

$$\alpha^s = -\frac{\kappa^s \beta^s + \kappa^s V / D_T^s}{\kappa^\ell \beta^\ell - \kappa^s \beta^s} \in \left[\frac{\kappa^s}{\kappa^\ell + \kappa^s}, \frac{\kappa^s D_T^\ell}{\kappa^\ell D_T^s} \right],$$

$$\alpha = \frac{\beta + V / D_c}{\beta + (1 - k)V / D_c} \in [0, 1].$$

Stability of the interface against infinitesimal perturbations depends on the sign of ω : the solidification front is stable if ω is negative for all wave numbers whereas it is unstable if ω is positive for any wave number. As $\kappa^s \beta^s - \kappa^\ell \beta^\ell \geq 0$, $\beta D_c / V + 1 - k \leq 0$ and $m_c G_c > 0$, the denominator is always positive and so the sign of ω depends only on the sign of the numerator, which is a combination of temperature, concentration and pressure gradient weighted by wave number dependent functions.

Convection has been taken into account when estimating the mean chemical gradient, but to be rigorous, we should have considered the effects of convection on the perturbed fields as well. We might have imposed, as Coriell et al. (1976) or Favier and Rouzaud (1983) did, that perturbations of the solute field must decay to zero on a finite length, imposed by convection, but numerical calculations not presented here show that this does not significantly affect the prediction of the stability of the interface. This can be understood as follows. With the additional hypothesis of a small solutal Peclet number $V / k_h D_c$ (that is, for instability wavelengths small compared to $2\pi D_c / V \simeq 300$ m, an hypothesis which will be shown in Section 5 to be well verified), β is very close to $-k_h$, and α is very close to one because $k_h \gg V / D_c$.

If taken into account, advection of the perturbed solutal field would decrease the decay length of the perturbations, and so increase β . This would make α to be even closer to one, but will hardly affect the value of the chemical term in the numerator. Effects on the stability limit and on the critical wavelength would therefore be insignificant. However, an increase of β would result in a decrease of the denominator, and hence in an increase of ω : the instability growth rate may be underestimated by Eq. (18), but this point will not weaken our analysis of the ICB solidification regime.

The dispersion relation confirms the qualitative differences between constant pressure solidification experiments and the crystallization of the inner core, as seen from the criterion of supercooling. In contrast with usual solidification, temperature gradients are negative and destabilizing, as α is positive. As $m_P G_P$ is negative, the pressure field stabilizes the interface against topography perturbations.

The differences between usual solidification and crystallization in a pressure field are illustrated in a $\ln V$ versus $\ln c$ diagram (Fig. 1) constructed from Eq. (18). The dashed curve is the neutral curve for the purely solutal stability problem: temperature gradients are taken to be constants and rejection of latent heat at the interface is neglected. In this limiting case, the neutral curve is very similar to that of constant pressure solidification (e.g., Davis, 2001): the curve possesses two asymptotic straight lines of slopes -1 and $+1$ which correspond to the constitutional supercooling limit and to the absolute stability limit, respectively, where the stabilizing effect of the surface tension becomes dominant. In con-

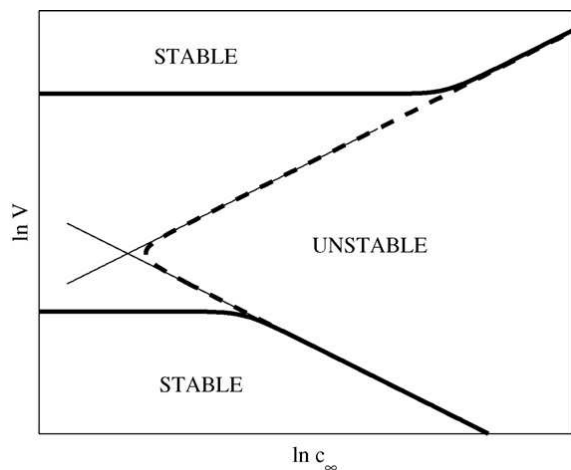


Fig. 1. Neutral curves for linear morphological stability, constructed from Eq. (18). The dashed line is the neutral curve for the purely solutal stability problem. The solid line is the neutral curve for the thermo-solutal stability problem.

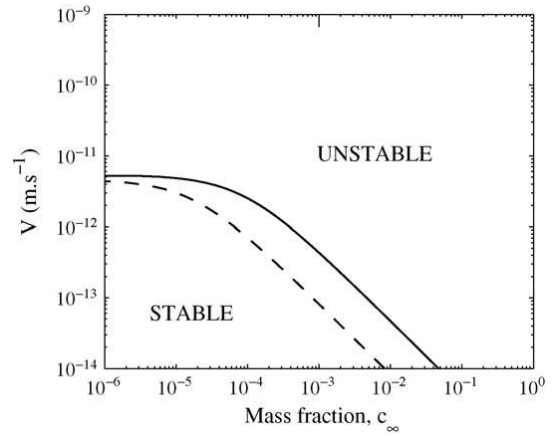


Fig. 2. Neutral curves for purely diffusive transport of solute (dashed line) and for advective transport (solid line). $m_c = -10^3$ K, $k = 0.2$.

stant pressure solidification, allowing perturbations of the thermal field slightly stabilizes the interface for small c , and flattens the nose of the marginal curve (Davis, 2001). In the system considered here, the thermal gradient is destabilizing, and even when solidifying a pure melt (no solutal destabilization), the solidification front may become unstable if the solidification velocity is high enough. The neutral curve of the complete thermo-solutal problem is shown as a solid line in Fig. 1. For low c_∞ , the instability is mainly thermally driven and the critical solidification velocity is independent of the concentration. As for the purely solutal destabilization, the system reaches an absolute stability limit for very high solidification rates, with the neutral curve being independent of c_∞ at small concentration.

Effects of advection on the stability limit is illustrated in Fig. 2, which represent neutral curves obtained with two different expressions for the chemical gradient at the interface. The dashed curve has been obtained with the upper bound of G_c , in inequality (8), and therefore corresponds to a purely diffusive solutal transport. The solid curve has been obtained with the lower bound of G_c , which corresponds to the case of maximum advective transport of solute. If the segregation coefficient k is small, convection has a considerable stabilizing effect: at a given solute concentration c , the critical solidification velocity can be as much as an order of magnitude greater than in the case of no convection.

4.2. Damping of instabilities by solid deformation

The only effect of the pressure gradient which has been considered so far is the pressure dependence of the melting temperature. Yet, because of the difference of density $\Delta\rho$ between the solid and the liquid, a surface

topography may induced horizontal pressure gradients which may tend to flatten the interface, therefore acting against its destabilization. To quantify the possible importance of solid flow on the interface stability, we will estimate the timescale of isostatic adjustment, assuming that the viscous deformation is driven by a balance between the pressure gradient and the viscous force:

$$0 = -\nabla p + \eta \nabla^2 \mathbf{u}, \quad (19)$$

where η is the solid state viscosity. Let us assume that the interface has a topography of amplitude h which varies on a length scale λ . We are still dealing with linear stability analysis and infinitesimal perturbations, so that, as λ is finite, $h \ll \lambda$. The finite amplitude case, i.e., dendrites compaction, will be considered in Section 6.1.2. Because $h \ll \lambda$, the deformation induced by the topography must be accommodated in depth, on a length-scale $\sim \lambda$, and the horizontal and vertical velocity u and w must be of the same order of magnitude. The horizontal pressure gradient is of order $\Delta \rho g h / \lambda$, $\nabla^2 u$ is of order u / λ^2 , so that:

$$u \sim w \sim \frac{\Delta \rho g}{\eta} h \lambda. \quad (20)$$

The timescale of isostatic adjustment can be defined as the ratio of the topography to the vertical velocity $\tau = h / w$, and is equal to:

$$\tau \sim \frac{\eta}{\Delta \rho g \lambda}. \quad (21)$$

In the limit of $h \ll \lambda$ which is considered here, τ has a finite value even for an infinitesimal amplitude h of the topography. This process is therefore relevant when dealing with linear stability analysis. We will however consider that this effect is negligible compared to the destabilizing effect of the thermal and compositional gradient, an assumption which will be justified a posteriori in Section 5.2 where τ will be compared to the timescale $1/\omega$ of the growth of an instability.

5. Morphological stability of the ICB

5.1. Thermo-physical parameters, composition, growth rate

As discussed in Section 2, the degree of supercooling and the stability of the boundary depend strongly on the abundance of solute and on the phase diagram of the crystallizing alloy, i.e., the liquidus slope and the segregation coefficient. The nature and relative abundances of light elements in the core are still uncertain (Poirier, 1994a), but recent studies seem to show a preference for O, S and

Si as major light elements (Ringwood and Hibberson, 1991; Stixrude et al., 1997; Alfè et al., 2002; Rubie et al., 2004). Very little is known about the phase diagrams of the candidate alloys and it is not even clear whether those systems have an eutectic or solid–solution behavior (Williams and Jeanloz, 1990; Knittle and Jeanloz, 1991; Boehler, 1993, 1996; Sherman, 1995). However, a fundamental constraint on the phase diagram of the iron-major light elements system is that the outer core is richer in light solute than the inner core. Major light components must therefore have a segregation coefficient k smaller than one and this necessarily imposes that their liquidus slopes m_c are negative near the Fe-rich end.

The liquidus slope and solute concentration of interest here are that of the fractionating elements. Elements which do not fractionate during the process of solidification, such as Ni and perhaps S and Si (Alfè et al., 2002), will not create chemical heterogeneity and hence will not contribute to supercooling and radial variations in melting temperature.

Assuming ideal mixing, a crude estimate of the liquidus slope of the core mixture at ICB pressure and temperature may be provided by the van't Hoff relation (Chalmers, 1964). We consider here the effect of alloying Fe with a single light element, of mole fraction x , on the melting temperature of the mixture. Chemical equilibrium between two multicomponents phases requires equality of the chemical potentials of each component in the two phases. In particular, the chemical potentials of the solvent, here Fe, must be equal in the liquid and in the solid: $\mu_{\text{Fe}}^{\ell} = \mu_{\text{Fe}}^{\text{s}}$. In an ideal solid or liquid solution, the chemical potential of a component i is expressed as $\mu_i = \mu_i^{\circ} + RT \ln x_i$, where x_i is the mole fraction of component i and μ_i° is the chemical potential of pure i . Equality of the chemical potentials of iron in the liquid and solid phases then requires that

$$\mu_{\text{Fe}}^{\text{os}} + RT \ln x_{\text{Fe}}^{\text{s}} = \mu_{\text{Fe}}^{\text{ol}} + RT \ln x_{\text{Fe}}^{\ell}, \quad (22)$$

which can be rewritten, using the fact that the mole fraction of the solute is $x = 1 - x_{\text{Fe}}$ and that $x^{\text{s}} = kx^{\ell}$, as

$$\frac{\mu_{\text{Fe}}^{\text{os}} - \mu_{\text{Fe}}^{\text{ol}}}{T} = R \ln \frac{1 - x^{\ell}}{1 - kx^{\ell}}. \quad (23)$$

Taking the derivative of Eq. (23) with respect to T , and using the Gibbs-Helmoltz relation then gives

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial T} \left(\ln \frac{1 - x^{\ell}}{1 - kx^{\ell}} \right)_P &= \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{\mu_{\text{Fe}}^{\text{os}} - \mu_{\text{Fe}}^{\text{ol}}}{RT} \right), \\ &= \frac{h_{\text{Fe}}^{\text{os}} - h_{\text{Fe}}^{\text{ol}}}{RT_{\text{m}}^2}, \quad = \frac{M_{\text{Fe}} L}{RT_{\text{m}}^2}, \end{aligned} \quad (24)$$

where $h_{\text{Fe}}^{\text{os}}$ and $h_{\text{Fe}}^{\text{ol}}$ are the molar enthalpy of solid and liquid Fe, respectively, $L = (h_{\text{Fe}}^{\text{os}} - h_{\text{Fe}}^{\text{ol}})/M_{\text{Fe}}$ is the latent heat of pure iron and M_{Fe} is the atomic weight of iron. Assuming k to be constant, for a dilute solution ($x^{\ell} \ll 1$), we obtain

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial T} \left(\ln \frac{1 - x^{\ell}}{1 - kx^{\ell}} \right)_P \\ = \left(\frac{k}{1 - kx^{\ell}} - \frac{1}{1 - x^{\ell}} \right) \frac{\partial x^{\ell}}{\partial T} \Big|_P \sim (k - 1) \frac{\partial x^{\ell}}{\partial T} \Big|_P \end{aligned} \quad (25)$$

which together with (24) yields, as m_c can be written as $\partial T_m / \partial x^{\ell}$,

$$m_c \simeq \frac{RT_m^{\circ 2}}{M_{\text{Fe}} L} (k - 1) \simeq (6 \pm 3)(k - 1) \times 10^3 \text{ K} \quad (26)$$

where T_m° is the melting temperature of pure iron at ICB pressure and m_c is given in Kelvin per atomic fraction; values and uncertainties of T_m° and L are from Table 1. This relation means that for an ideal solution, the liquidus slope and the segregation coefficient are related by parameters which are independent of the nature of the alloying element. For a non-partitioning element ($k = 1$), the ideal liquidus slope is equal to zero, whereas a highly partitioning element (k small compared to 1) will have a high liquidus slope. Through this relation, constraints on k may provide informations on the liquidus slope of the core mixture.

From estimates of the volume change during melting and of the density jump at the inner core boundary, Anderson and Ahrens (1994) estimated the ratio of light

elements in the outer core to that in the inner core to be approximately 4–1. This gives a global segregation factor $k = 0.25$ and, by Eq. (26), a liquidus slope $m_c \simeq -4.5 \pm 2.5 \times 10^3 \text{ K}$. Note that the segregation factor estimated here is an effective segregation factor, which is higher than the thermodynamic one, and should give a lower bound of $|m_c|$. This estimate may be appropriate if there is only one light element in the core, but finer estimates are needed if there are several light elements of comparable concentrations. As an example, the *ab initio* simulations of Alfè et al. (2002) suggest that the outer core may be composed of $\simeq 10$ mole% of S and/or Si and ~ 8 mole% ($\simeq 2$ wt.%) of O. According to Alfè et al. (2002), S and Si do not significantly fractionate and the density jump at the ICB may be accounted for by fractionation of oxygen alone, whose segregation coefficient has been estimated to be 0.02. With this value, m_c tends to its $k = 0$ bound $m_c \simeq -6 \pm 3 \times 10^3 \text{ K}$. In what follows, two chemical models of the core will be considered: one with a single light element of concentration $\simeq 10$ wt.%, and the other with only one fractionating light element (but several light elements), oxygen, of concentration $\simeq 2$ wt.%.

Our relation is similar to the one derived by Alfè et al. (2002). Stevenson (1981) and Anderson and Duba (1997) estimated the melting point depression by assuming equilibrium between a pure solid and an alloyed liquid, and therefore obtained the upper bound of our estimate (i.e., our $k = 0$ value). Those theoretical estimates are in poor agreement with experiments. Experimental results on the melting temperature of the Fe–O system (Knittle and Jeanloz, 1991; Boehler, 1993) predict a small melting temperature depression, and perhaps a solid-solution behavior. The case of the Fe–S system is more controversial. Williams and Jeanloz (1990) results suggest that the eutectic behavior persists at high pressure, and predict a significant melting point depression (m_c is of order $-5 \times 10^3 \text{ K}$ at core-mantle boundary pressure). In contrast Boehler (1996) found that the Fe–FeS eutectic melting depression becomes much smaller at high pressures, and conclude that this supports the possibility of solid-solution between Fe and FeS at core pressures. To our knowledge, there is no experimental work at this pressure range dealing with other candidate alloys. In the present work, values of m_c between -10^2 K and -10^4 K will be considered.

The interfacial energy of iron at ICB conditions can be deduced from estimates of the latent heat of crystallization, because those two parameters both derive from the difference of atoms bonds energy between the solid and liquid phase. The interfacial energy per atom γ_a can be calculated to be 1/4 of the atomic latent heat

Table 1
Parameters used in this study

Claeyron slope	m_P	$\simeq 10^{-8} \text{ K Pa}^{-1a}$
Liquidus slope	m_c	-10^2 to -10^4 K^b
Light elements concentration	c_{∞}	2 to 10 wt.% ^b
Growth rate of the inner core	V	6×10^{-12} to $2 \times 10^{-11} \text{ m s}^{-1b}$
Temperature at the ICB	T_{ICB}	5000 to 6000 K ^{a, c}
Specific heat at constant pressure	c_P	$860 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$
Latent heat of crystallization	L	600 ^c to 1200 kJ kg^{-1a}
Thermal conductivity in the liquid	κ^{ℓ}	$63 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1d}$
Thermal conductivity in the solid	κ^s	$79 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1d}$
Thermal diffusivity in the liquid	D_T^{ℓ}	$6 \times 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1d}$
Thermal diffusivity in the solid	D_T^s	$7 \times 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1d}$
Chemical diffusivity	D_c	$10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1c}$
Viscosity of the inner core	η	10^{16} to 10^{21} Pa s^b
Liquid–solid interfacial energy	γ	$0.4 \pm 0.2 \text{ J m}^{-2b}$
Gibbs–Thomson coefficient	Γ	$\simeq 2 \times 10^{-7} \text{ K m}^b$

^a From Anderson and Duba (1997).

^b See text.

^c From Poirier (1994b).

^d From Stacey and Anderson (2001).

L_a for a flat close-packed surface (Chalmers, 1964). Estimates of the latent heat of iron at ICB conditions range from 600 kJ kg^{-1} to 1200 kJ kg^{-1} (Poirier, 1994b; Anderson and Duba, 1997; Laio et al., 2000; Vočadlo et al., 2003a) and from these values, we estimate the interfacial energy per unit area γ to be $0.4 \pm 0.2 \text{ J m}^{-2}$, which can be compared to the 0.204 J m^{-2} value at standard conditions (Chalmers, 1964).

Buffett et al. (1992) proposed an analytical model of growth of the inner core and found that the radius increase at leading order as the root square of time, $r = r_{ic} \sqrt{t/a}$, where r_{ic} is the present radius of the inner core and a is its age. The present solidification velocity is then $V = r_{ic}/2a$. If the inner core is young (e.g., Labrosse et al., 2001; Nimmo et al., 2004), i.e., $a \sim 1 \text{ Ga}$, V is found to be $2 \times 10^{-11} \text{ m s}^{-1}$. On the other hand, if the inner core nucleated around 3 Ga ago, as Christensen and Tilgner (2004) claim, V could be of order $6 \times 10^{-12} \text{ m s}^{-1}$. Wen (2006) observed a temporal change of travel time of the PKiKP phase between the two events of an earthquake doublet, indicating a localized change of the inner core radius of about 1 km in 10 years. This observation may be interpreted as reflecting episodic growth of the inner core, coupled with non-stationary convection in the outer core (Wen, 2006). The resulting instantaneous solidification velocity is $\simeq 10 \text{ km}/10 \text{ years} \simeq 10^{-6} \text{ m s}^{-1}$, which is much higher than the mean solidification velocity estimated from models of the core thermal history.

Other parameters used in this study, with values currently found in the literature, are listed in Table 1.

5.2. Supercooling and stability analysis

The liquid at the ICB is supercooled if condition (3) is satisfied. This criterion can be rewritten, using the heat balance at the interface (Eq. (14)), as:

$$\frac{L_v V}{\kappa^\ell} + m_c G_c - \frac{\kappa^s}{\kappa^\ell} G_T^s > \rho g m p. \quad (27)$$

Depending on the age of the inner core, on the value of the thermal conductivity and on the hypothetical presence of radioactive elements, the thermal gradient G_T^s in the inner core at the ICB may vary widely (Yukutake, 1998). However, the thermal term $L_v V/\kappa^\ell$, which is the contribution to supercooling from the heat released by crystallization, is high enough to balance the pressure term if the solidification velocity is higher than $\sim 5 \times 10^{-12} \text{ m s}^{-1}$. This is roughly equal to the lowest estimates of V , and, as the term $-G_T^s$ is positive, it is thus likely that thermal terms alone are sufficiently high to ensure supercooling. The chemical term $m_c G_c$

is probably much higher, at least one order of magnitude greater than the pressure term if m_c is as small as -10^2 K and three order of magnitude greater if $m_c = -10^4 \text{ K}$, and the conclusion that the vicinity of the ICB is indeed supercooled seems to be inescapable.

We now use the dispersion Eq. (18) to investigate more quantitatively the stability of an initially plane solid–liquid interface in the actual conditions of the ICB. As discussed in Section 3, we choose to take the lower bound of the chemical gradient, given by Eq. (9), so that the effect of convection on the basic state may be overestimated rather than underestimated. We tested several values of each parameter within their uncertainty ranges and found that for all plausible sets of values, the ICB is unstable. The liquidus slope is by far the most critical parameter. Because the chemical gradient is proportional to m_c , the two orders of magnitude uncertainty on m_c propagate directly in the uncertainties on the location of the marginal stability curve. Neutral curves for linear stability are plotted in Fig. 3, with $m_c = -10^2 \text{ K}$, -10^3 K and -10^4 K , $G_T^s = 0 \text{ K m}^{-1}$ and $k = 0.25$. Despite the strong dependence on m_c of the neutral curve location, the solidification velocity is two orders of magnitude greater than the critical velocity for a liquidus slope as small as -10^2 K , and three or four orders of magnitude greater than the critical velocity for a liquidus slope of -10^3 K or -10^4 K . If the growth of the inner core is episodic, with a much higher instantaneous solidification velocity, the ICB would be even more unstable.

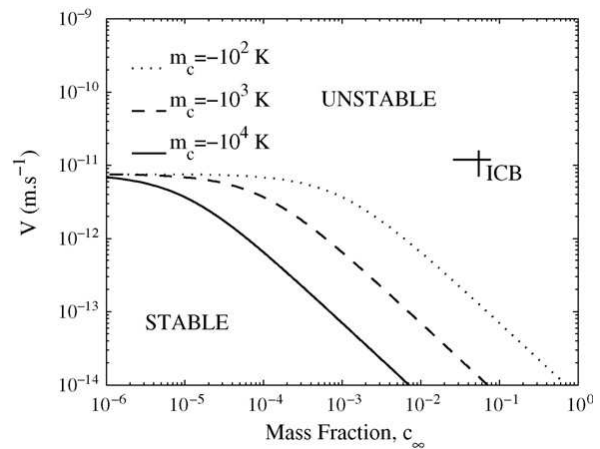


Fig. 3. Neutral curves for linear morphological stability, with $m_c = -10^2 \text{ K}$ (dotted line), $m_c = -10^3 \text{ K}$ (dashed line) and $m_c = -10^4 \text{ K}$ (solid line). $G_T^s = 0 \text{ K m}^{-1}$ and $k = 0.25$. The straight lines cross is the location of the ICB in the stability diagram. Uncertainties in V result from uncertainties in the age of the inner core. The value of c_∞ depends on the chemical model chosen: $c_\infty \simeq 10 \text{ wt.}\%$ if there is only one dominant light element, and $c_\infty \simeq 2 \text{ wt.}\%$ if the model of Alfè et al. (2002) is adopted.

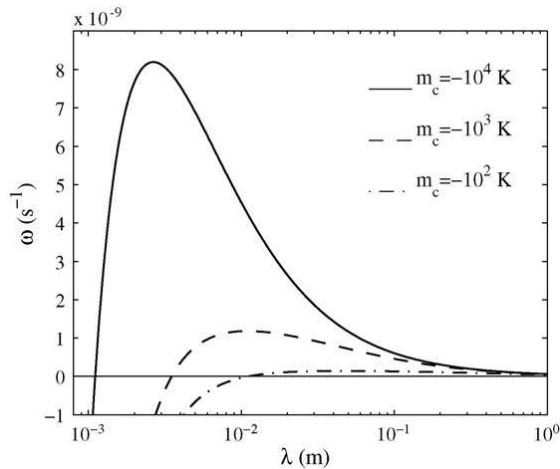


Fig. 4. Growth rate of infinitesimal perturbations against wave length, at the conditions of the ICB, for $m_c = -10^4$ K (solid line), -10^3 K (dashed line) and -10^2 K (dash-dotted line). $k = 0.02$ and $L_v = 600 \text{ kJ kg}^{-1}$.

In Fig. 4, the growth rate of infinitesimal perturbations has been plotted against wave length, at the conditions of the ICB, for three different values of m_c . The corresponding time-scales range from a few years to about 300 years. We may now estimate the timescale of isostatic adjustment, given by Eq. (21), and compare it to the timescale of instability growth. The solid inner core viscosity is poorly constrained: estimates range from 10^{16} Pa s to more than 10^{21} Pa s (Buffett, 1997; Yoshida et al., 1996). A lower estimate of the viscous flow timescale may be given by taken $\eta = 10^{16} \text{ Pa s}$. With $\Delta\rho = 600 \text{ kg m}^{-3}$, $g = 4.4 \text{ m s}^{-1}$ (Dziwonski and Anderson, 1981), the isostatic adjustment timescale is of order $10^{14} \text{ s} \simeq 3 \times 10^6$ years for $\lambda \sim 1 \text{ cm}$, about four or six orders of magnitude greater than the timescale of instability growth: isostatic adjustment will not delay the instability. Our results are consistent with the conclusion of Shimizu et al. (2005) that the timescale of dendrites growth is very short compared to the timescale of inner core growth, suggesting that a mushy layer will indeed form at the ICB.

Results have been presented here for parameters (growth rate, thermal and pressure gradient) inferred for the present state of the inner core, but when dealing with the internal structure of the inner core, it is of equal interest to investigate what was the solidification regime during its past history. As explained before, the solidification regime depends primarily upon the thermal, solutal and pressure gradients at the interface, the thermal and solutal fields being destabilizing whereas the pressure field is stabilizing. Because the solidification velocity was most certainly greater in the past than

it is today, the rates of release of heat and solute were also greater; thermal and solutal gradients were therefore steeper (more destabilizing). In addition, the liquidus slope $m_P G_P$ is less steep at deeper depth (because the gravity field, and hence the pressure gradients decrease to zero at the center of the Earth), and therefore less stabilizing. At first order, all terms seem to act in the same way, and it is then likely that the solidification of the inner core has been dendritic for most of its history.

6. Length scales of the mush

6.1. Vertical length scales

6.1.1. Thermodynamic depth of the mushy zone

In the laboratory, and in metallurgical applications, the mushy zone depth is typically a few centimeters. However, because of the very small temperature gradient in the inner core, and of the additional effect of pressure, the temperature in the inner core remains close to the melting temperature, which suggests that liquid enriched in solute may remain thermodynamically stable at considerable depths (Fearn et al., 1981).

While freezing occurs in the mushy zone, interdendritic melt is further enriched in solute, lowering its melting temperature further. An enriched liquid phase can coexist with the solid phase as long as the actual temperature is above the melting temperature. The depth δ_{Th} at which a liquid of concentration $c = c_o + \Delta c$ can be in thermodynamic equilibrium with the surrounding solid phase is then given by equating the actual and melting temperatures:

$$T(\delta_{Th}) = T_m(\delta_{Th}). \quad (28)$$

To a good approximation, the acceleration of gravity is linear in r in the inner core, so that pressure is quadratic in radius. Assuming for convenience the temperature profile to be quadratic as well (which is a not so bad approximation if the cooling rate is approximately constant within the inner core), the following expression for δ_{Th} can be found:

$$\frac{\delta_{Th}}{r_{ic}} \simeq \sqrt{\frac{|m_c| \Delta c}{\Delta \Theta}}, \quad (29)$$

where $\Delta \Theta \simeq 150$ to 200 K is the difference between the actual temperature and the melting temperatures (at outer core composition) at the center of the inner core (Yukutake, 1998). The precise form of the temperature profile (quadratic or not) is not of great importance for our order of magnitude estimates.

The mushy zone can extend to the center of the inner core ($\delta_{Th}/r_{ic} = 1$) if the variation of melting temperature

with pressure is compensated by $|m_c|\Delta c$. The maximum allowable light elements concentration is the concentration at the eutectic (if it exists), and the maximum value of $|m_c|\Delta c$ is therefore $|m_c|(c_E - c_0)$. Taking $c_E = 25$ at.% as a plausible value (Stevenson, 1981), we found from Eq. (29) that $\delta_{Th} = r_{ic}$ if $|m_c|$ is greater than 1.3×10^3 K. On the other hand, if $|m_c|$ is as small as 10^2 K, the resulting depth of liquid thermodynamic equilibrium is of the order of 300 km.

6.1.2. A collapsing mushy zone?

As noted by Loper (1983), a fundamental observation is that the ICB appears to be sharp on seismic wavelength scale (~ 10 km), which means that the solid fraction at the top of the inner core must become significant within a few kilometers in depth, a fact that seems at first view hard to reconcile with the presence of a hundred kilometers thick mushy zone. Loper (1983) argued that convective motions in the mush may cause the dendrites to thicken and calculated that the solid fraction may become of order one at $\simeq 300$ m below the top of the mushy zone, thus explaining the seismic observations.

In addition to this process, the solid mass fraction may also increase in depth because of gradual collapse of the dendrites under their own weight. The physical process at stake is quite similar to the isostatic adjustment considered in Section 4: the density difference between the solid and the liquid implies horizontal pressure gradients which increase with depth in the mushy zone, making the dendrites to broaden at their base by viscous solid flow. The timescale of dendrites widening may be estimated by considering equilibrium between the horizontal pressure gradient and the viscous force in the solid (Eq. (19)), as was done in Section 4. Here the horizontal length scale λ , say the diameter of a dendrite, is supposed to be small compared to the height h of a dendrite. As before, the horizontal velocity at depth h is of order:

$$u \sim \frac{\Delta \rho g}{\eta} h \lambda, \quad (30)$$

but the timescale of interest is now the ratio of horizontal length scale to the horizontal velocity $\tau_c = \lambda/u$, so that the timescale of dendrite widening – or compaction – is:

$$\tau_c \sim \frac{\eta}{\Delta \rho g h}, \quad (31)$$

which is inversely proportional to the height of the dendrite. As long as the timescale of dendrites growth is small compared to τ_c , the depth of the mushy zone increases. When increasing the height of the dendrites, the timescale of dendrites widening decreases, and a sta-

tionary state is eventually reached, where the growth of the dendrites by solidification at their tips is balanced by the collapse of the mushy zone. This stationary depth is then found by equating τ_c to the timescale of dendrites growth, which is h/V when the system is stationary. This yields:

$$h \sim \sqrt{\frac{\eta V}{\Delta \rho g}}. \quad (32)$$

Uncertainties in h come mostly from uncertainties in the viscosity. With $\eta = 10^{16}$ Pa s, h is found to be a few meters, a very small value, whereas $\eta = 10^{21}$ Pa s leads to $h \sim 1$ km (Sumita et al., 1996). Although estimates of h span more than two orders of magnitude, they are in any case significantly smaller than the thermodynamic estimate of the depth of the mushy zone. This means that as a result of compaction, the solid fraction may become of $O(1)$ at a few h in depth, well before the thermodynamic limit of liquid equilibrium is reached.

6.2. Horizontal length scale: interdendritic spacing

Interdendritic spacing λ_1 (the distance between two dendrites tips) is a length scale of considerable interest for the structure of the inner core. Because each columnar crystal is usually made of many dendrites (Kurz and Fisher, 1989), the interdendritic spacing gives a lower bound of the grain size, and hence may give hints on the deformation mechanism and viscosity relevant to the possible viscous deformation of the inner core. In addition, the primary dendrite spacing is needed for estimating the permeability of the mush, which is roughly proportional to λ_1^2 (Bergman and Fearn, 1994). Permeability is a necessary parameter for the study of the mush hydrodynamics (e.g., Bergman and Fearn, 1994; Le Bars and Worster, 2006), or for quantitative compaction models (Sumita et al., 1996).

We make the assumption that dendrites have an axisymmetric shape described by a function $g(z)$, which is linked to the solid fraction $f(z)$ by the relation:

$$f(z) = \frac{\pi g^2(z)}{A(\lambda_1)}, \quad (33)$$

where $A(\lambda_1)$ is the horizontal surface area occupied by a dendrite. In a cubic dendritic array, $A(\lambda_1)$ is simply λ_1^2 , whereas in a hexagonal dendritic array, $A(\lambda_1) = 3/2 \tan(\pi/3) \lambda_1^2 \simeq 0.86 \lambda_1^2$.

f and g^2 are proportional through a constant involving λ_1 , so that if f is known, an additional constraint on g is enough to determine λ_1 . This constraint can be given by

Langer and Müller-Krumbhaar's theory of dendrite tip radius selection (Langer and Müller-Krumbhaar, 1977), in which the dendrite tip radius R is equal to the shortest wavelength λ_i for which the interface is unstable. This theory is in very good agreement with experiments, and we will follow it in the present work. It can be shown (see Kurz and Fisher, 1989) that at low solutal Peclet number ($Pe_c = VR/D \ll 1$), a condition well satisfied here, the chemical gradient G_c at the dendrite tip is equal to the lower bound of the chemical gradient we used in our stability analysis (Eq. (9)). Estimates of λ_i from our stability analysis thus directly give the adequate R . A good approximation for R at low solutal and thermal Peclet numbers can be derived from Eq. (18), noting that the chemical term in the numerator of (18) is much bigger than the thermal and pressure terms (Kurz and Fisher, 1989):

$$R \simeq 2\pi \sqrt{\frac{\Gamma D}{m_c c_\infty (k-1)V}} \quad (34)$$

R ranges from ~ 1 mm if $m_c = -10^4$ K to ~ 1 cm if m_c is as low as -10^2 K (see Fig. 4). Uncertainties from other parameters than m_c are much smaller.

On the other hand, the dendrite tip radius R is equal to the radius of curvature of g taken in $z = 0$ which is by definition equal to:

$$R = -\frac{(1 + g'(0)^2)^{3/2}}{g''(0)} \quad (35)$$

where R is defined to be positive. Inserting Eq. (33) into (35), with the boundary condition $f(0) = 0$, yields

$$A(\lambda_1) = \frac{2\pi R}{\partial f / \partial z|_{\text{ICB}}} \quad (36)$$

or, for an hexagonal dendritic array:

$$\lambda_1 = \sqrt{\frac{2\pi R}{0.86(\partial f / \partial z)|_{\text{ICB}}}} \quad (37)$$

Although simple, this relation is quite general, the only assumptions made here being that of stationary state and that of an axisymmetric dendrite tip. If the appropriate assumptions on solute transport and selection of dendrites tip radius are made, classical models of primary dendrite spacing (Trivedi, 1984; Hunt, 1979) follow from Eq. (37).

These models have been derived for non-convecting mushy zones where the solid fraction increase smoothly from zero to one at the thermodynamic depth of the

mush, that is, $\partial f / \partial z|_{\text{ICB}}$ scales as $1/\delta_{\text{Th}}$.¹ However, seismology tells us that the ICB is sharp on a scale of 10 km, which means that the scale length of solid fraction increase at the top of the inner core is obviously not the thermodynamic mushy zone depth, and must be at maximum ~ 10 km. Therefore, a minimum order of magnitude of $\partial f / \partial z|_{\text{ICB}}$ is $1/10 \text{ km} = 10^{-4} \text{ m}^{-1}$. This may give upper bounds for λ_1 ; we found $\lambda_1 \sim 10$ m if $m_c = -10^4$ K and $\lambda_1 \sim 30$ m if $m_c = -10^2$ K. Tighter constraints may be found if we could estimate more precisely $\partial f / \partial z|_{\text{ICB}}$. Compaction is not expected to affect significantly the dendrites spacing because it is not effective in the very top of the mush. The solid fraction profile in the upper few meters, from which the primary spacing results, is more probably controlled by convection. In his convective mushy zone model, Loper (1983) found that $\partial f / \partial z|_{\text{ICB}} \sim 3 \times 10^{-3} \text{ m}^{-1}$. With this value and our estimates of R , we found λ_1 to be 1 to 5 meters. In Loper's estimate, $\partial f / \partial z|_{\text{ICB}}$ is proportional to the typical velocity W of descending liquid close to the ICB, taken to be around 10^{-6} m s^{-1} . This value is quite uncertain, but as λ_1 is inversely proportional to the square root of $\partial f / \partial z|_{\text{ICB}}$, a change of two orders of magnitude in W is needed in order to change the order of magnitude of λ_1 . As a consequence, and considering all sources of uncertainties, it appears difficult to have an interdendritic spacing of more than a few tens of meters, our preferred estimate being a few meters. If the growth of the inner core is episodic, the interdendritic spacing is expected to be smaller. As $\lambda_1 \propto V^{-1/4}$, taking $V = 10^{-6} \text{ m s}^{-1}$ instead of $V = 10^{-11} \text{ m s}^{-1}$ would result in an interdendritic spacing about twenty times smaller than estimated above, that is, a few tens of centimeters.

Our estimates are significantly smaller than estimate of a few hundred meters from scaling laws (Bergman, 1998). This is not surprising because those scaling laws have been derived for non-convecting (and non-compacting) mushy zones, where f is linearly increasing in the whole thermodynamic mushy zone. Assuming for a demonstrative purpose that f increases linearly from 0 to 1 within the thermodynamic mushy zone, whose depth is taken equal to the inner core radius, Eq. (37) gives $\lambda_1 \sim 100\text{--}300$ m, in very good agreement with Bergman's estimate.

¹ Note that, in laboratory experiments, with no pressure gradient and with a constant temperature gradient $\delta_{\text{Th}} \sim m_c(c_e - c_\infty)/G_T$, so that, as $R \propto V^{-1/2}$, $\lambda_1 \propto G_T^{-1/2} V^{-1/4}$. This scaling law has been shown to be in very good agreement with experiments (e.g., Kurz and Fisher, 1989).

Our assumption of an axisymmetric dendritic shape is justified if the iron phase at inner core conditions is fcc or bcc iron (Vočadlo et al., 2003b), but might not hold if it is ϵ -iron, as hcp materials (e.g., ice or zinc) usually have plateshaped dendrites, known as platelets (Bergman et al., 2003). If iron dendrites are indeed platelets, estimating the inter-platelets spacing would require some modifications of our analysis to take into account the specific geometry of platelets. Although this is expected to give quantitatively different results, this should not alter the qualitative conclusion that convection in the mush reduces the interdendritic spacing, and that interdendritic spacing at ICB should be much smaller than suggested by classic scaling laws.

7. Conclusion

The morphological stability of an initially plane solidification front at the ICB conditions has been investigated. Despite the stabilizing effects of convection and of the pressure gradient, a continuous solidification implies non-zero solutal and thermal gradients at the ICB which, for plausible parameters values, are high enough for the interface to be destabilized. Because the conditions in the past were even more destabilizing, it is probable that the ICB has been dendritic through most of the inner core history.

Thermodynamic considerations predict a very thick mushy zone which, as noted by Fearn et al. (1981), could possibly extend to the center of the Earth. However, considerable uncertainties on the phase diagram do not allow a precise estimate of the thermodynamic depth, which may be only a few tens of kilometers if the liquidus slope is small. The most superficial part of the inner core may be understood as a collapsing mushy zone, where both convection and compaction act to rapidly increase the solid fraction within a length scale probably smaller than 1 km, making the ICB to appear seismically sharp. The length scale of the thermodynamic depth of the mushy zone and the compaction length scale, although clearly different, are unconstrained by the current knowledge of the phase diagram of the core mixture and of the solid iron viscosity at inner core conditions. Progress in the determination of these parameters may greatly help the understanding of the inner core structure.

We tried to constrain the primary dendrite spacing λ_1 of the mushy zone. λ_1 appears to depend on the vertical derivative of the solid fraction at the top of the mush which, in turn, depends on the vigor of convection in the mush. Here again, it is difficult to make precise and reliable estimates, but we found that the interdendritic spacing is most probably smaller

than a few tens of meters, and possibly only a few meters.

Whether or not a significant amount of melt may subsists at large depth remains an open question. If the mush permeability is of order $\lambda_1^2/100$ (Bergman and Fearn, 1994), our estimate of λ_1 suggests permeability values higher than 10^{-2} m^2 . The work of Sumita et al. (1996) suggests that with such a high permeability, the liquid will be very efficiently removed from the inner core by compaction, and that the residual liquid fraction will be essentially zero. A high permeability in the mush does not however rule out the possibility that unconnected, trapped liquid pockets persist in depth. The answer to this question may depend in part on surface tension driven processes. Sintering, i.e., migration of grain boundaries driven by surface tension, may play an important role in the redistribution of the liquid phase and have consequences on the efficiency of compaction, in a way which will depend on the wetting properties of the melt. If the (unknown) dihedral angle of light elements rich liquid iron in contact with solid iron is greater than 60° (Bulau et al., 1979), the liquid phase is expected to become unconnected at a given liquid fraction, thus leaving a residual liquid phase in the inner core.

Acknowledgement

We thank the two anonymous reviewers for their careful reviews and constructive suggestions. We are grateful to Thierry Duffar, Hisayochi Shimizu, Jean-Louis Le Mouél and Jean-Paul Poirier for helpful discussions. Careful reading and useful comments by Dominique Jault, Alexandre Fournier, Philippe Cardin, Franck Plu-nian and Elisabeth Canet were much appreciated.

References

- Alfè, D., Gillan, M.J., Price, G.D., 2002. Ab initio chemical potentials of solid and liquid solutions and the chemistry of the Earth's core. *J. Chem. Phys.* 116, 7127–7136.
- Anderson, O.L., Duba, A., 1997. Experimental melting curve of iron revisited. *J. Geophys. Res.* 102, 22659–22670.
- Anderson, W., Ahrens, T., 1994. An equation of state for liquid iron and implications for the Earth's core. *J. Geophys. Res.* 99, 4273–4284.
- Bergman, M.I., 1998. Estimates of the Earth's inner core grain size. *Geophys. Res. Lett.* 25, 1593–1596.
- Bergman, M.I., Agrawal, S., Carter, M., M., M.-S., 2003. Transverse solidification textures in hexagonal close-packed alloys. *J. Crystal Growth* 255, 204–211.
- Bergman, M.I., Fearn, D.R., 1994. Chimneys on the Earth's inner-outer core boundary? *Geophys. Res. Lett.* 21, 477–480.
- Boehler, R., 1993. Temperatures in the Earth's core from melting-point measurements of iron at high static pressures. *Nature* 363, 534–536.

- Boehler, R., 1996. Fe–FeS eutectic temperatures to 620 kbar. *Phys. Earth Planet. Inter.* 96, 181–186.
- Braginsky, S., 1963. Structure of the F layer and reasons for convection in the Earth's core. *Dokl. Akad. Nauk. SSSR Engl. Trans.* 149, 1311–1314.
- Buffett, B.A., 1997. Geodynamics estimates of the viscosity of the Earth's inner core. *Nature* 388, 571–573.
- Buffett, B.A., Huppert, H.E., Lister, J.R., Woods, A.W., 1992. Analytical model for solidification of the Earth's core. *Nature* 356, 329–331.
- Bulau, J.R., Waff, H.S., Tyburczy, J.A., Oct 1979. Mechanical and thermodynamic constraints on fluid distribution in partial melts. *J. Geophys. Res.* 84, 6102–6108.
- Cao, A., Romanowicz, B., 2004. Hemispherical transition of seismic attenuation at the top of the Earth's inner core. *Earth planet. Sci. Lett.* 228, 243–253.
- Chalmers, B., 1964. *Principles of Solidification*. J. Wiley & Sons, NY, 319 pp.
- Christensen, U., Tilgner, A., 2004. Power requirement of the geodynamo from ohmic losses in numerical and laboratory dynamos. *Nature* 429, 169–171.
- Coriell, S., Hurler, D., Sekerka, R., 1976. Interface stability during crystal growth: the effect of stirring. *J. Crystal Growth* 32, 1–7.
- Davis, S.H., 2001. *Theory of Solidification*. Cambridge University Press, Cambridge, UK, p. 400.
- Dziewonski, A.M., Anderson, D.L., 1981. Preliminary reference Earth model. *Phys. Earth Planet. Inter.* 25, 297–356.
- Favier, J.J., Rouzaud, A., 1983. Morphological stability of the solidification interface under convective conditions. *J. Crystal Growth* 64, 367–379.
- Fearn, D., Loper, D., Roberts, P., 1981. Structure of the Earth's inner core. *Nature* 292, 232–233.
- Gubbins, D., Alfè, D., Masters, G., Price, G.D., Gillan, M., 2004. Gross thermodynamics of two-component core convection. *Geophys. J. Int.* 157, 1407–1414.
- Hunt, J., 1979. *Solidification and Casting of Metals*. The Metal Society, London.
- Jacobs, J., 1953. The Earth's inner core. *Nature* 172, 297.
- Knittle, E., Jeanloz, R., 1991. The high-pressure phase diagram of Fe(0.94)O—a possible constituent of the earth's core. *J. Geophys. Res.* 96, 16169–16180.
- Kurz, W., Fisher, D., 1989. *Fundamentals of Solidification*. Trans Tech Publications, Switzerland, 305 pp.
- Labrosse, S., Poirier, J.-P., Le Mouél, J.-L., 2001. The age of the inner core. *Earth planet. Sci. Lett.* 190, 111–123.
- Laio, A., Bernard, S., Chiarotti, G.L., Scandolo, S., Tosatti, E., 2000. Physics of Iron at Earth's Core Conditions. *Science* 287, 1027.
- Langer, J., Müller-Krumbhaar, H., 1977. Stability effects in dendritic crystal growth. *J. Crystal Growth* 42, 11–14.
- Le Bars, M., Worster, M., 2006. Interfacial conditions between a pure fluid and a porous medium: implications for binary alloy. *J. Fluid Mech.* 550, 149–173.
- Loper, D., Roberts, P., 1981. A study of conditions at the inner core boundary of the Earth. *Phys. Earth Planet. Inter.* 24, 302–307.
- Loper, D.E., 1983. Structure of the inner core boundary. *Geophys. and Astrophys. Fluid Dyn.* 25, 139–155.
- Morse, S.A., 1986. Adcumulus growth of the inner core. *Geophys. Res. Lett.* 13, 1466–1469.
- Morse, S.A., 2002. No mushy zones in the Earth's core. *Geochimica and Cosmochimica Acta* 66, 2155–2165.
- Mullins, W., Sekerka, R., 1963. Stability of a planar interface during solidification of a dilute binary alloy. *J. Appl. Phys.* 35, 444–451.
- Nimmo, F., Price, G.D., Brodholt, J., Gubbins, D., 2004. The influence of potassium on core and geodynamo evolution. *Geophys. J. Int.* 156, 363–376.
- Poirier, J.-P., 1994a. Light elements in the Earth's outer core: A critical review. *Phys. Earth Planet. Inter.* 85, 319–337.
- Poirier, J.-P., 1994b. Physical properties of the Earth's core. *C.R. Acad. Sci. Paris* 318, 341–350.
- Ringwood, A.E., Hibberson, W., 1991. Solubilities of mantle oxides in molten iron at high pressures and temperatures—implications for the composition and formation of Earth's core. *Earth planet. Sci. Lett.* 102, 235–251.
- Rubie, D.C., K., G.C., Frost, D. J., 2004. Partitioning of oxygen during core formation on the Earth and Mars. *Nature* 429, 58–61.
- Sherman, D.M., 1995. Stability of possible Fe–FeS and Fe–FeO alloy phases at high pressure and the composition of the Earth's core. *Earth planet. Sci. Lett.* 132, 87–98.
- Shimizu, H., Poirier, J.-P., Le Mouél, J.-L., 2005. On crystallization at the inner core boundary. *Phys. Earth Planet. Inter.* 151, 37–51.
- Stacey, F.D., Anderson, O.L., 2001. Electrical and thermal conductivities of Fe–Ni–Si alloy under core conditions. *Phys. Earth Planet. Inter.* 124, 153–162.
- Stevenson, D.J., 1981. Models of the earth's core. *Science* 214, 611–619.
- Stixrude, L., Wasserman, E., Cohen, R.E., 1997. Composition and temperature of Earth's inner core. *J. Geophys. Res.* 102, 24729–24740.
- Sumita, I., Yoshida, S., Kumazawa, M., Hamano, Y., 1996. A model for sedimentary compaction of a viscous media and its application to inner-core growth. *Geophys. J. Int.* 124, 302–324.
- Trivedi, R., 1984. Interdendritic Spacing. II. –A Comparison of Theory and Experiment. *Metall. Trans. A.* 15A, 977–982.
- Vočadlo, L., Alfè, D., Gillan, M.J., Price, G.D., 2003a. The properties of iron under core conditions from first principles calculations. *Phys. Earth Planet. Inter.* 140, 101–125.
- Vočadlo, L., Alfè, D., Gillan, M.J., Wood, I., Brodholt, J., Price, G.D., 2003b. Possible thermal and chemical stabilization of body-centred-cubic iron in the Earth's core. *Nature* 424, 536–539.
- Wen, L., 2006. Localized temporal changes of the Earth's inner core boundary. *Science* 314, 967–970.
- Williams, Q., Jeanloz, R., 1990. Melting relations in the iron-sulfur system at ultra-high pressures—implications for the thermal state of the earth. *J. Geophys. Res.* 95, 19299–19310.
- Yoshida, S., Sumita, I., Kumazawa, M., 1996. Growth model of the inner core coupled with the outer core dynamics and the resulting elastic anisotropy. *J. Geophys. Res.* 101, 28085–28104.
- Yukutake, T., 1998. Implausibility of thermal convection in the Earth's solid inner core. *Phys. Earth Planet. Inter.* 108, 1–13.

Tectonic history of the Earth's inner core preserved in its seismic structure

Renaud Deguen^{*} and Philippe Cardin

The Earth's inner core is structurally complex and its texture as well as the degree of its seismic anisotropy¹ varies with depth². In the modern inner core, an uppermost isotropic layer^{3,4} surrounds a deeper and more anisotropic region that includes the seismically distinct innermost inner core^{5–7}. This structural complexity is probably related to strain resulting from the growth of the inner core⁸. However, as most dynamic models of anisotropy generation^{8–11} have considered only current deformation, how strain evolved through time and influenced texture is not fully understood. Here we use a numerical model to couple preferential crystallization in the equatorial region of the inner core⁸ with density stratification arising from inner-core growth, allowing both to evolve over the entire history of the inner core. Our results suggest that the inner core evolves gradually from a regime in which deformation penetrates into the deepest parts to a regime in which it is confined to the uppermost region. The deep anisotropy is therefore best understood as a fossil anisotropy inherited from horizontal Maxwell stresses (arising because of the magnetic field)¹⁰ or texture formation during solidification^{12–14}. The structure of the upper layers, on the other hand, probably results from active tectonics induced by heterogeneous growth of the inner core.

The Earth's inner core has grown with a density stratification, owing to the solidification-induced partitioning of the various solutes present in the core, and particularly light elements such as Si, O and S (ref. 15, 16). The composition of the outer core evolves as crystallization of the inner core proceeds and, as solid and liquid concentrations are linked by the partition coefficient, the secular chemical evolution of the outer core has been imprinted in the crystallizing inner core. Partitioning of the light elements results in a newly crystallized alloy that is more solute-rich, and intrinsically lighter, than the deeper solid. As the inner core grows, a more and more stable density profile builds up, with the chemically induced density difference between the centre of the core and the inner core boundary (ICB) increasing at first order as the cube of the radius of the inner core r_{ic} (see the Methods section). Using *ab initio* estimates¹⁵ of the partitioning behaviour of O, Si and S and chemical models of the core^{15,16}, we estimate the present chemically induced density difference between the centre of the core and the ICB to be $\sim 5 \text{ kg m}^{-3}$.

Depending on the growth rate of the inner core or, equivalently, on its age, the temperature field can be either stabilizing or destabilizing (Fig. 1). If the growth rate of the inner core is relatively large (for an inner core younger than $\sim 600 \text{ Myr}$ in Fig. 1), thermal diffusion is inefficient to quantitatively remove the inner-core superheat and a thermally driven convective episode may have occurred in the early history of the inner core. As the inner core grows, however, the compositional profile strengthens and eventually stabilizes the inner core against any convective instability (Fig. 1). This early convective episode may plausibly account for the

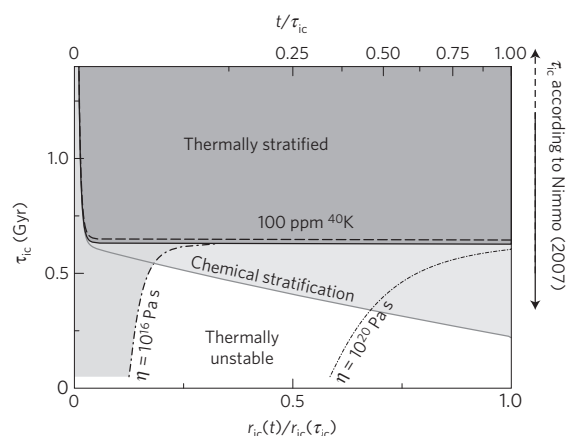


Figure 1 | Stability diagram of the inner core. For a given inner-core age (τ_{ic} , vertical axis), the inner core evolves from left to right as its radius (horizontal axis) increases. The geotherm in the inner core is subadiabatic in the dark grey field above the solid black line, and superadiabatic if the inner core is younger. This limit is only slightly offset by the presence of 100 ppm of potassium (dashed black line). The presence of chemical stratification (solid grey line) significantly extends the stratified field towards lower values of τ_{ic} . Dotted-dashed lines: inner-core radius at which the inner-core Rayleigh number becomes supercritical, for two values of η . The admissible range of inner-core age, according to Nimmo¹⁷, is shown.

presence of an innermost region with distinct elastic properties^{5–7}, but this dynamical explanation for the origin of the innermost inner core would require a relatively young inner core. There are very large uncertainties on the critical value of the age of the inner core above which the geotherm in the inner core would be subadiabatic; depending on the parameter set, we found a critical inner-core age ranging from essentially 0 to $\sim 1 \text{ Gyr}$ (see the Methods section). For comparison, Nimmo¹⁷ estimated an inner-core age range of 0.37–1.90 Gyr. A short convective episode is therefore not implausible, but the case of an older, thermally stratified, inner core seems more likely and we focus on that case in what follows.

The earliest suggestions of deformation mechanisms^{8–10} in the inner core have relied on large-scale flows penetrating deep in the inner core with a large component of radial motion. The stratification of the inner core will preclude thermal convection¹⁸, but will also more generally tend to inhibit any radial flow¹⁹. In particular it has been shown²⁰ have shown that the poloidal part of the Lorentz forces, which would drive an intense flow in the inner core in the absence of stratification¹⁰, would be almost exactly balanced by the buoyancy forces arising from the deflection of isodensity surfaces, and would not induce significant strain. Another deformation mechanism has been proposed by

LGIT, CNRS, Université Joseph-Fourier, 38041 Grenoble, France. *e-mail: renaud.deguen@obs.ujf-grenoble.fr.

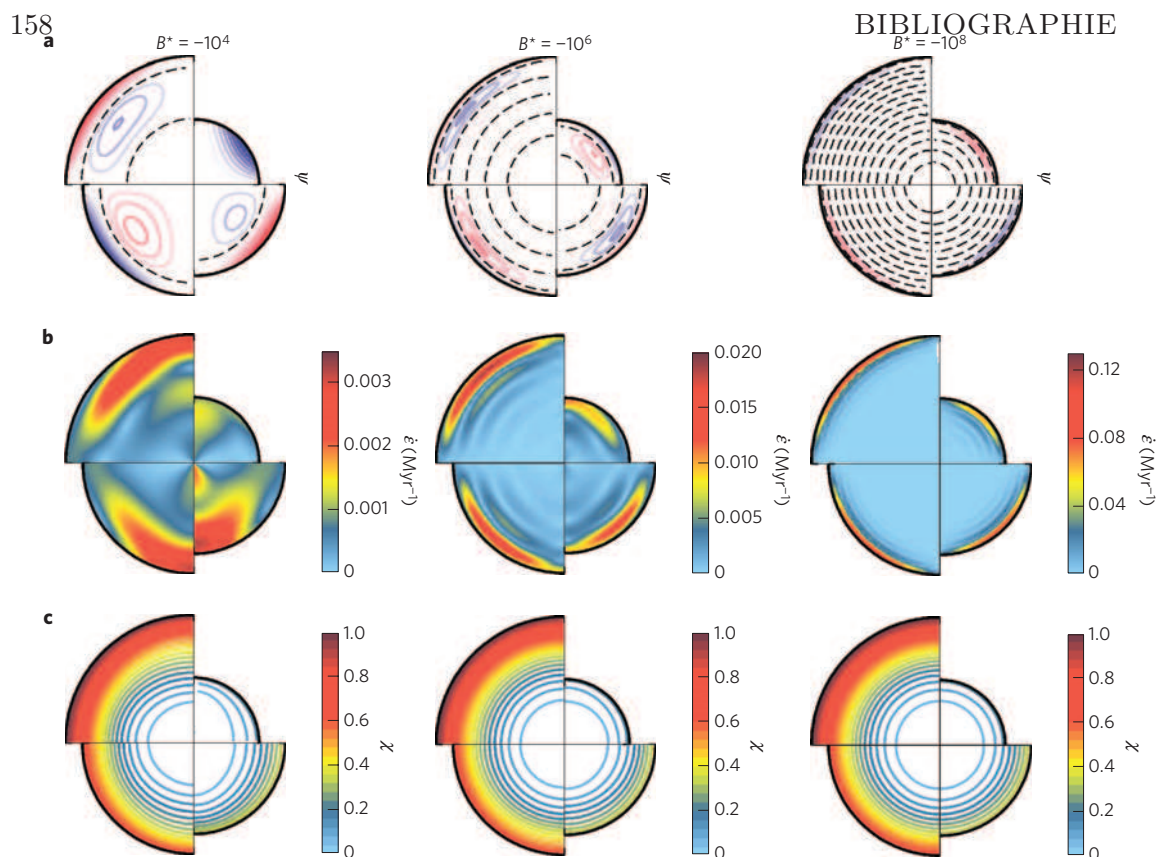


Figure 2 | Evolution with time of the flow induced by preferential growth of the inner core at the Equator. All subfigures are divided into four quadrants, which correspond to non-dimensional times $t = 0.25, 0.5, 0.75$ and 1 , starting clockwise from the upper right quadrant; the radius of each quadrant reflects the value of $r_{ic}(t)$. **a**, Stream function ψ . Blue and red lines for $\psi < 0$ and > 0 respectively; thin black dashed lines for $\psi = 0$. **b**, von Mises equivalent strain rate $\dot{\epsilon}$, in Myr^{-1} . **c**, Non-dimensional light-element concentration χ . The computations were made with $S_2 = 2/5$, which corresponds to a solidification rate two times higher at the Equator than at the poles²³. With $\Delta\rho_\chi = -5 \text{ kg m}^{-3}$ and $u_{ic} = 10^{-11} \text{ m s}^{-1}$, the values of B^* ($-10^4, -10^6$ and -10^8) correspond to $\eta = 10^{20}, 10^{18}$ and 10^{16} Pa s respectively. Larger values of B^* give patterns similar to the case $B^* = -10^8$ with still thinner convection cells.

Yoshida *et al.*⁸, who assumed that columnar convection in the outer core enhances heat transport in the equatorial regions compared with polar regions, and results in higher solidification rates in the equatorial belt^{21–23}. It was shown⁸ that isostatic adjustment would impede any significant topography at the ICB and drive a viscous degree-2 flow from the Equator to the poles. In contrast with the flow induced by the Lorentz forces¹⁰, deformation cannot be suppressed by the stratification because the topography and resulting stress would then accumulate and eventually overcome the buoyancy forces associated with the tilting of the isodensity surfaces. We show here that the presence of stratification drastically alters the geometry and strength of the flow.

We calculated the evolution with time of the flow field as the inner core grows by solving the Stokes equation, here including buoyancy forces, coupled with an equation of light-element transport (see the Methods section). The problem depends on two non-dimensional numbers. One is S_2 , which measures the degree of preferential crystallization at the Equator, the solidification rate anomaly being written in terms of the Legendre polynomial of degree 2 as $S_2 u_{ic}(t) P_2(\cos\theta)$ (ref. 8), where $u_{ic}(t)$ is the mean inner-core growth rate. The second one is a time-dependent non-dimensional number, hereafter called the ‘buoyancy number’, which compares the buoyancy arising from deformation of the isodensity surfaces with the viscous forces, and is defined as

$$B = \frac{g(t) \Delta\rho_\chi(t) r_{ic}(t)^2}{\eta u_{ic}(t)}$$

where $g(t)$ is the gravity at the ICB at time t , η is the dynamic viscosity and $\Delta\rho_\chi(t)$ is the chemically induced density difference between the ICB and the centre of the inner core (negative in the case of stable stratification). The magnitude of B significantly increases during the history of the inner core because of both the strengthening of the stratification ($\Delta\rho_\chi \sim -r_{ic}^3$ and $g \propto r_{ic}$) and the increase of the typical length scale, r_{ic} , which makes the viscous transfer of momentum less efficient. Assuming for the sake of simplicity that the inner core grows as the square root of time²⁴, B is then at first order proportional to $-r_{ic}^7 \propto -t^{7/2}$. There are very large uncertainties on both the buoyancy number (mostly owing to our poor knowledge of the viscosity) and on S_2 . We have therefore explored a large range of parameter values, with some representative simulations presented in Fig. 2. The typical flow velocity and strain rate are commensurate with S_2 , but the value of S_2 hardly affects the geometry of the flow, which depends essentially on B .

With a present buoyancy number, noted B^* , of -10^4 ($\eta \sim 10^{20} \text{ Pa s}$), the flow is very close to the case with no stratification studied by Yoshida *et al.*⁸ in the early history of the inner core, but is progressively confined in the uppermost inner core as the inner core grows and the stratification strengthens. The strain rates are very small however and the flow would not induce a significant texture by dislocation glide mechanisms. Stress-induced recrystallization is a possibility⁸, but would probably require a large amount of time⁸, and no significant inner-core polar wander, to produce the required crystal alignment.

BIBLIOGRAPHIE

For larger values of $|B^*|$, the presence of stratification clearly inhibits vertical motion, constraining the flow to be parallel to the isodensity surfaces¹⁹ and concentrating the flow in the upper inner core. Horizontal motion is still transmitted viscously to larger depth and results in a vertical series of elongated cells of alternating vorticity (their thicknesses scaling as $\sim |B|^{-1/5} r_{ic}$) but the associated strain rates become increasingly small in depth. The localization of the flow produces large shear stress with associated large strain rates in a shallow layer between the two upper cells. In this layer, a 100% strain would develop in a timescale of $1/\dot{\epsilon} \sim (r_{ic}/u_{ic}) S_2^{-1} |B|^{-2/5}$, about 10 Myr for $B^* = -10^8$ ($\eta \sim 10^{16}$ Pa s). The large stresses would favour a dislocative creep mechanism^{25,26}, and this relatively short timescale suggests that a strong texture will indeed develop and probably significantly alter any solidification texturing. If the stable iron phase is hexagonal close-packed and if the slip system is predominantly basal^{11,25,27}, then the c axis would tend to be preferentially oriented radially^{11,25,27}, a texture that would appear as seismologically isotropic (that is, shallow polar and equatorial paths would encounter the same mean crystal orientation, and would present no significant differences in travel times). We propose that this shallow flow explains the presence of the upper isotropic layer. We also note that an east/west hemispherical solidification rate asymmetry, as predicted from both experiments²⁸ and numerical simulations²³, would induce an asymmetry of the strength of the flow, which might account for the hemispherical asymmetry of this layer^{3,4}. A possibility is that the difference in seismic properties between the two hemispheres results from a different degree of alteration of the texture initially acquired during solidification.

An interesting and fundamental question is whether the structure of the inner core as seen by seismology results from present deformation or has been mostly inherited from the past inner-core dynamics. It has been argued²⁶ that a low viscosity in the inner core would favour the former interpretation, by facilitating deformation and texture development. We reach an essentially opposite conclusion. In our simulations, the strain rate in the deeper inner core is weak and deformation is unlikely to significantly alter the accordingly fossilized texture. This is also true for zonal deformation mechanisms, which have maximum strains near the surface of the inner core¹¹. The most plausible deformation mechanism to explain the deep anisotropy seems to be zonal deformation induced by the azimuthal component of the Lorentz force¹¹, because the resulting flow is horizontal, and therefore unaffected by the stratification. The strain rate for this mechanism scales as $\dot{\epsilon} \propto B_\phi B_z / \eta$, where B_ϕ and B_z are the component of the magnetic field along the azimuthal direction and parallel to the Earth's rotation axis¹¹. It is large enough to induce a significant texture for $\eta \lesssim 10^{16}$ Pa s (ref. 11), but becomes prohibitively small for larger viscosities. If the inner-core viscosity is larger than $\sim 10^{17}$ Pa s, the only viable alternative among the mechanisms proposed so far is solidification texturing^{12–14}.

We argue that the seismologically observed structure of the inner core is the time-integrated result of possibly several texturing mechanisms, with the deeper inner core being now unaffected by any flow and exhibiting a fossil texture. This is in line with the complex picture of the inner core that emerges from seismological studies^{2,5–7}, which would be difficult to interpret as resulting from only one, currently active, mechanism. At a more general level, this means that, at least in principle, clues about the inner-core history, and particularly its thermal history and age and the possibility of an early convective event, might emerge from the seismological exploration of the inner core.

Methods

Chemical and thermal structure of the inner core. The evolution with time of the abundance in the outer core of a given element is estimated from the

Rayleigh law²⁹, which links its concentration in the liquid, $c^l(t)$, to its initial concentration, c_0^l , through the ratio of the mass of solid crystallized, $M_s(t)$, to the initial liquid mass, M_0 , by $c^l(t) = c_0^l [1 - M_s(t)/M_0]^{k-1}$, where k is the partition coefficient. If compressibility-induced density variations in the core are ignored, then $M_s(t)/M_0 \simeq (r_{ic}(t)/r_c)^3$ and the resulting concentration profile $c(r)$ within the inner core is written as

$$c(r) = k c_0^l \left[1 - \left(\frac{r}{r_c} \right)^3 \right]^{k-1}$$

where r_c is the core radius, from which it comes

$$\Delta \rho_\chi(t) = \beta \rho k c_0^l \left[\left(1 - \left(\frac{r_{ic}}{r_c} \right)^3 \right)^{k-1} - 1 \right] \sim \beta \rho k (1-k) c_0^l \left(\frac{r_{ic}}{r_c} \right)^3$$

where $\beta = (1/\rho)(\partial \rho / \partial c)$ is the chemical expansion coefficient and ρ is the mean density of the inner core.

We calculated the evolution with time of the temperature profile in the inner core by solving numerically the heat conduction equation, and used the results to construct the regime diagram in Fig. 1. These calculations were made with a thermal conductivity $k = 60 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$, a heat capacity $c_p = 850 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$, a thermal expansivity $\alpha = 1.1 \times 10^{-5} \text{ K}^{-1}$ and a Clapeyron slope $m_p = 8.5 \times 10^{-9} \text{ K Pa}^{-1}$ (ref. 30). In parallel, we derived an approximate analytic expression for the geotherm as a function of time (see Supplementary Information), which is then compared with the adiabatic profile. We found that the inner core is subadiabatic if τ_{ic} , the age of the inner core, is larger than

$$\tau_{ic} > \tau_c \left(\frac{dT_s}{dT_{ad}} - 1 \right) = \frac{r_{ic}^2}{6\kappa} \left(\frac{m_p \rho c_p}{\alpha T} - 1 \right)$$

where τ_c is the thermal diffusion time and dT_s/dT_{ad} is the ratio of the Clapeyron slope to the adiabatic gradient. This simple criterion gives a good estimate of the critical age above which the inner core is subadiabatic, and has the advantage of making apparent its sensitivity to the relevant parameters. There are considerable uncertainties on both τ_c and on dT_s/dT_{ad} . We estimate (see Supplementary Information) that $\tau_c = 1.4 \pm 0.3$ Gyr and dT_s/dT_{ad} ranges from 1.06 to 1.6, yielding a critical inner-core age ranging from ~ 60 Myr to ~ 1 Gyr, in good agreement with the numerical calculations (see Supplementary Fig. S1).

Numerical simulations. We model the inner core as an isoviscous, incompressible fluid in a spherical shell of radius $r_{ic}(t)$. In the Boussinesq approximation, the equations of momentum conservation and light-element transport are written in dimensionless form as

$$\mathbf{0} = -\nabla p - \frac{B(t)}{S_2} (\chi - \bar{\chi}) \mathbf{r} + \nabla^2 \mathbf{u}$$

$$\frac{\partial \chi}{\partial t} = -\tau_{ic} \frac{\Delta c}{\Delta c} \chi - \frac{\tau_{ic}}{r_{ic}(t)/u_{ic}(t)} (S_2 \mathbf{u} - \mathbf{r}) \cdot \nabla \chi$$

where \mathbf{u} and p are the fluid velocity and dynamic pressure, χ is the scaled light-element concentration, $\bar{\chi}$ is the horizontal average of χ and \mathbf{r} is the radius vector. Lengths, fluid velocity and pressure have been scaled by $r_{ic}(t)$, $S_2 u_{ic}(t)$ and $\eta S_2 u_{ic}(t)/r_{ic}(t)$, respectively. The scaled concentration is defined as $\chi = [c - c(r=0)]/\Delta c$, where $\Delta c = c(r_{ic}(t)) - c(r=0)$.

The growth of the inner core is taken into account naturally by the time-dependent scaling used here. Indeed, scaling lengths by $r_{ic}(t)$ transforms the problem from a moving boundary problem into a fixed boundary problem, with the ICB fixed at $r = 1$. In the equation of chemical transport, the first term in the right-hand side of the equation is a sink term, which appears because the concentration scale is time dependent. There is also an extra radial advection term, which accounts for the apparent inward transport of matter in the new referential. No similar term is introduced in the momentum conservation equation as long as inertia is negligible, which is indeed a most reasonable assumption because the Reynolds number is $\sim 10^{-16 \pm 5}$ for this flow.

With the scaling used here, $\chi = 1$ at the ICB during all of the simulation. The ICB is treated as a stress-free surface, and the radial velocity is prescribed to be equal to the opposite of the solidification rate anomaly, $u_r(r_{ic}, \theta) = -S_2 u_{ic} P_2(\cos \theta)$ (ref. 8). This is justified by the fact that the relaxation time of a degree-2 topography is very small compared with τ_{ic} . As a consequence, the inner-core topography must be in a quasi-steady state, with the growth-rate anomaly balanced by the radial velocity at the ICB.

Received 160 7 January 2009; accepted 15 April 2009;
published online 17 May 2009

References

- Poupinet, G., Pillet, R. & Souriau, A. Possible heterogeneity of the Earth's core deduced from PKIKP travel times. *Nature* **305**, 204–206 (1983).
- Souriau, A. in *Treatise on Geophysics* Vol. 1 (ed. Schubert, G.) (Elsevier, 2007).
- Garcia, R. & Souriau, A. Inner core anisotropy and heterogeneity level. *Geophys. Res. Lett.* **27**, 3121–3124 (2000).
- Niu, F. L. & Wen, L. X. Hemispherical variations in seismic velocity at the top of the Earth's inner core. *Nature* **410**, 1081–1084 (2001).
- Ishii, M. & Dziewonski, A. M. The innermost inner core of the earth: Evidence for a change in anisotropic behavior at the radius of about 300 km. *Proc. Natl Acad. Sci. USA* **99**, 14026–14030 (2002).
- Sun, X. & Song, X. The inner inner core of the Earth: Texturing of iron crystals from three-dimensional seismic anisotropy. *Earth Planet. Sci. Lett.* **269**, 56–65 (2008).
- Niu, F. L. & Wen, L. X. Seismic evidence for distinct anisotropy in the innermost inner core. *Nature Geosci.* **1**, 692–696 (2008).
- Yoshida, S., Sumita, I. & Kumazawa, M. Growth model of the inner core coupled with the outer core dynamics and the resulting elastic anisotropy. *J. Geophys. Res.* **101**, 28085–28104 (1996).
- Jeanloz, R. & Wenk, H.-R. Convection and anisotropy of the inner core. *Geophys. Res. Lett.* **15**, 72–75 (1988).
- Karato, S.-I. Seismic anisotropy of the Earth's inner core resulting from flow induced by Maxwell stresses. *Nature* **402**, 871–873 (1999).
- Buffett, B. A. & Wenk, H.-R. Texturing of the Earth's inner core by Maxwell stresses. *Nature* **413**, 60–63 (2001).
- Karato, S.-I. Inner core anisotropy due to the magnetic field-induced preferred orientation of iron. *Science* **262**, 1708–1711 (1993).
- Bergman, M. I. Measurements of elastic anisotropy due to solidification texturing and the implications for the Earth's inner core. *Nature* **389**, 60–63 (1997).
- Brito, D., Elbert, D. & Olson, P. Experimental crystallization of gallium: Ultrasonic measurements of elastic anisotropy and implications for the inner core. *Phys. Earth Planet. Inter.* **129**, 325–346 (2002).
- Alfè, D., Gillan, M. J. & Price, G. D. Ab initio chemical potentials of solid and liquid solutions and the chemistry of the Earth's core. *J. Chem. Phys.* **116**, 7127–7136 (2002).
- Badro, J. *et al.* Effect of light elements on the sound velocities in solid iron: Implications for the composition of Earth's core. *Earth Planet. Sci. Lett.* **254**, 233–238 (2007).

BIBLIOGRAPHIE

- Nimmo, F. in *Treatise on Geophysics* Vol. 8 (ed. Schubert, G.) (Elsevier, 2007).
- Yukutake, T. Implausibility of thermal convection in the Earth's solid inner core. *Phys. Earth Planet. Inter.* **108**, 1–13 (1998).
- Turner, J. S. *Buoyancy Effects in Fluids* (Cambridge Univ. Press, 1980).
- Buffett, B. A. & Bloxham, J. Deformation of Earth's inner core by electromagnetic forces. *Geophys. Res. Lett.* **27**, 4001–4004 (2000).
- Glatzmaier, G. A. & Roberts, P. H. Dynamo theory then and now. *Int. J. Eng. Sci.* **36**, 1325–1338 (1998).
- Bergman, M. I., MacLeod-Silberstein, M., Haskel, M., Chandler, B. & Akpan, N. A laboratory model for solidification of Earth's core. *Phys. Earth Planet. Inter.* **153**, 150–164 (2005).
- Aubert, J., Amit, H., Hulot, G. & Olson, P. Thermochemical flows couple the Earth's inner core growth to mantle heterogeneity. *Nature* **454**, 758–761 (2008).
- Labrosse, S., Poirier, J.-P. & Le Mouél, J.-L. The age of the inner core. *Earth Planet. Sci. Lett.* **190**, 111–123 (2001).
- Wenk, H.-R., Matthies, S., Hemley, R. J., Mao, H.-K. & Shu, J. The plastic deformation of iron at pressures of the Earth's inner core. *Nature* **405**, 1044–1047 (2000).
- Van Orman, J. A. On the viscosity and creep mechanism of Earth's inner core. *Geophys. Res. Lett.* **31**, 20606 (2004).
- Poirier, J. P. & Price, G. D. Primary slip system of ϵ -iron and anisotropy of the Earth's inner core. *Phys. Earth Planet. Inter.* **110**, 147–156 (1999).
- Sumita, I. & Olson, P. A laboratory model for convection in Earth's core driven by a thermally heterogeneous mantle. *Science* **286**, 1547–1549 (1999).
- Albarède, F. *Introduction to Geochemical Modeling* (Cambridge Univ. Press, 1996) (ISBN 0521578043).
- Vočadlo, L. in *Treatise on Geophysics* Vol. 2 (ed. Schubert, G.) (Elsevier, 2007).

Acknowledgements

We would like to thank P. Olson, C. Finlay, N. Arndt, J. Serafini and the Geodynamo group (LGIT, Grenoble) for discussions and comments on this letter. This work was supported by the SEDIT programme of CNRS-INSU.

Additional information

Supplementary information accompanies this paper on www.nature.com/naturegeoscience. Reprints and permissions information is available online at <http://npg.nature.com/reprintsandpermissions>. Correspondence and requests for materials should be addressed to R.D.

Supplementary Information for: Tectonic history of Earth's inner core preserved in its seismic structure

R. Deguen and Ph. Cardin

LGIT, CNRS, Université Joseph Fourier, Grenoble, France.

1 Stratification

1.1 Chemical stratification

The evolution with time of the abundance in the outer core of a given element can be estimated from the Rayleigh law¹, which links the concentration in the liquid $c^\ell(t)$ of a given element to its initial concentration c_0^ℓ through the ratio of the mass of solid crystallized at time t , $M_s(t)$, to the initial liquid mass, M_0 , by $c^\ell(t) = c_0^\ell [1 - M_s(t)/M_0]^{k-1}$, where k is the partition coefficient. If compressibility induced density variations in the core are ignored, then $M_s(t)/M_0 \sim (r_{ic}(t)/r_c)^3$ and the concentration profile $c(r)$ within the inner core can be written as

$$c(r) = kc_0^\ell \left(1 - \left(\frac{r}{r_c} \right)^3 \right)^{k-1}, \quad (1)$$

where r_c is the core radius. The intrinsic density difference across the inner core induced by the concentration profile is then

$$\Delta\rho_\chi(t) = \beta\rho kc_0^\ell \left[\left(1 - \left(\frac{r_{ic}}{r_c} \right)^3 \right)^{k-1} - 1 \right] \sim \beta\rho k(1-k)c_0^\ell \left(\frac{r_{ic}}{r_c} \right)^3, \quad (2)$$

where $\beta = (1/\rho)(\partial\rho/\partial c)$ is the chemical expansion coefficient. The density difference across the inner core is, at first order in $(r_{ic}/r_c)^3$, proportional to $k(1-k)$ so radial density variations would be the highest for k around 0.5 and substantially smaller for k either small or close to one.

Ab initio estimates of the partitioning behaviour of O, Si and S by Alfè *et al.*² gives similar values for Si and S, $k_{\text{Si/S}} \simeq 0.8$ and a much smaller value for O, $k_0 = 2.5 \times 10^{-3}$. With $\beta \sim -0.5$ to -1 ³, chemical models of the core^{4,2,5} then gives a present intrinsic density difference between the center of the core and the inner core boundary (ICB) of $\sim -5 \text{ kg.m}^{-3}$. Taking into account compressibility gives a present value of $\Delta\rho_\chi$ approximately 1.16 times larger. We emphasize that the values of the partition coefficients taken here² are either small or close to one, and are not chosen as to maximize the chemically induced density stratification, which would be much larger if k differs more significantly

from 0 or 1. We are therefore confident that our estimate is not significantly overestimated.

Nickel would have an opposite effect (*i.e.* an unstable density profile), but has a density too close to that of iron to induce comparable density variations, unless $k_{\text{Ni}} \sim 0.5$, which seems unlikely given its low pressure partitioning behaviour⁶.

1.2 Thermal stratification

In order to investigate the conditions for thermal stratification, we calculate the evolution with time of the temperature profile in the inner core as follows. The heat conduction equation, including radiogenic heating if needed, is transformed by mapping the radius in the inner core $[0, r_{\text{ic}}(t)]$ onto $[0, 1]$ by scaling the radius r with $r_{\text{ic}}(t)$ ⁷. The resulting equation is solved numerically using a Crank-Nicholson scheme, with the temperature at the ICB imposed to be equal to the solidification temperature at ICB pressure. Our results are in agreement with the calculations of Yukutake⁸, performed with $\tau_{\text{ic}} = 1.5$ Gy and 4.5 Gy. For a given set of thermophysical parameters, this procedure is repeated for different values of τ_{ic} , treated here as a free parameter. The calculated temperature profile at each time is compared to the adiabat and we then plot the limit between the subadiabatic and superadiabatic fields in function of the age of the inner core and of its radius at time t , as shown in the figure 1 of the main text.

Figure S1 shows the range of the location of superadiabatic/subadiabatic limit, taking c_p in the range 650–850 J.kg^{−1} (ref^{9,10}), $k = 50–60$ W.m^{−1}.K^{−1} (ref⁹), $\alpha = 1.2 \pm 0.1 \times 10^{-5}$ K^{−1} (ref¹⁰), $\rho = 13000$ kg.m^{−3} (ref¹¹), and the results from Alfè *et al.*¹² for T and m_p ($T \simeq 5500$ K, $m_p = \partial T_s / \partial P \simeq 8.5 \times 10^{-8}$ K.Pa^{−1}). The uncertainties on the parameters result in large uncertainties on the limit between stable and unstable thermal stratification, with a critical inner core age ranging from almost 0 Gy to ~ 1 Gy. We show on the same figure the estimated age of the inner core by Labrosse *et al.*¹³ and the range of inner core age estimations from a compilation by Nimmo¹⁴ of several studies. There is clearly an overlap between the critical inner core age and the range of the estimated inner core age. The overlap becomes smaller if the core contains ~ 100 ppm or more of potassium.

In order to assess the uncertainties on the location of the limit between stable and unstable thermal stratification, it is useful to find an analytical criterion for thermal stratification. To make the problem tractable analytically we assume that density and all thermophysical parameters are constant in the inner core, and assume that the inner core grows as the square root of time. In the absence of radiogenic heat sources in the inner core the heat conduction equation writes

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right), \quad (3)$$

where κ is the thermal diffusivity. The temperature at the ICB is equal to the solidification temperature at the ICB pressure

$$T(r_{\text{ic}}) = T_s(r_{\text{ic}}) = T_s(0) - \rho g' m_p \frac{r_{\text{ic}}^2}{2}, \quad (4)$$

where g' is the radial derivative of the gravity and $m_p = \partial T_s / \partial P$ is the Clapeyron slope, assumed constant in the inner core pressure range. If the inner core

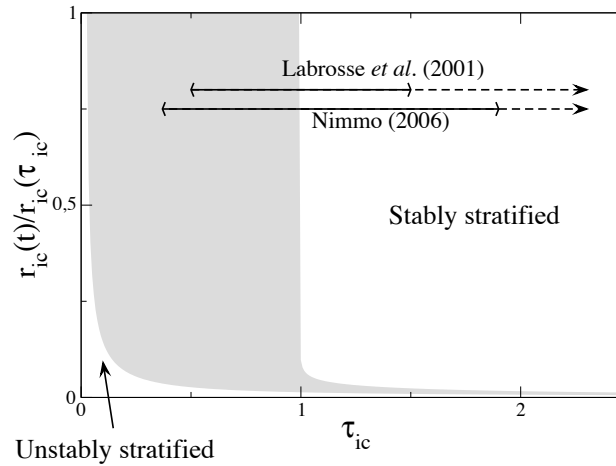


Figure S1 - Thermal stability diagram of the inner core, as a function of the inner core age, τ_{ic} and its radius at time t . The grey shaded region shows the range of location of the thermal stability limit corresponding to the range of parameters quoted in the text. The grey shaded region separates a region where the geotherm is subadiabatic (on the right of the diagram) from a superadiabatic region. The range of parameters used here (see text) results in a critical inner core age ranging from essentially 0 Gy to about 1 Gy. Estimated age of the inner core by Labrosse *et al.*¹³ and Nimmo¹⁴ are shown for comparison.

grows as the square root of time, $r_{ic} = r_{ic}^* \sqrt{t/\tau_{ic}}$, r_{ic}^* being the present inner core radius, then the temperature at the ICB decreases linearly with time,

$$T(r_{ic}) = T_s(0) + \dot{T}_s t \quad \text{with} \quad \dot{T}_s = -\frac{1}{2} m_P \rho g' \frac{r_{ic}^{*2}}{\tau_{ic}}, \quad (5)$$

where $T_s(0)$ is the solidification temperature at the center of the Earth. The linear time dependence of the boundary temperature suggests that, after a transient period, the cooling rate in the inner core should tend to be homogeneous and independent of time. This is supported by the results of the numerical resolution of the problem, and we therefore assume that $\partial T/\partial t$ is constant in time and space and equal to \dot{T} . The solution of equation (3) is then

$$T(r) = \dot{T} \left(\frac{r^2}{6\kappa} + t \right) + T_s(0). \quad (6)$$

It is incorrect to assume that $\dot{T} = \dot{T}_s$ because the ICB is a moving boundary. Rather, equating the temperature at the ICB from equation (6) with the solidification temperature gives a relation between \dot{T} and \dot{T}_s ,

$$\dot{T} \left(1 + \frac{\tau_{ic}}{\tau_{\kappa}} \right) = \dot{T}_s, \quad (7)$$

where $\tau_{\kappa} = r_{ic}^{*2}/(6\kappa)$ is the inner core thermal diffusion timescale. The temperature and the temperature gradient in the inner core can then be written

as

$$T(r) = \frac{\dot{T}_s}{1 + \tau_\kappa/\tau_{ic}} \left(\frac{r^2}{6\kappa} + t \right) + T_s(0) \quad (8)$$

and

$$\frac{\partial T}{\partial r} = \frac{1}{1 + \tau_{ic}/\tau_\kappa} \frac{\partial T_s}{\partial r} = -\frac{m_P \rho g'}{1 + \tau_{ic}/\tau_\kappa} r. \quad (9)$$

If the age of the inner core is small compared to the thermal diffusion time $\tau_\kappa = r_{ic}^{*2}/(6\kappa)$, then the geotherm would be close to the solidification temperature, while the inner core would be \sim isothermal is $\tau_{ic} \gg \tau_\kappa$.

Relative variations of T in the inner core are small, at most $\sim 5\%$. If we neglect the variations of T in its expression, the adiabatic gradient is at first order linear in radius,

$$\frac{\partial T_{ad}}{\partial r} = -\frac{\alpha g T}{c_p} = -\frac{\alpha g' T}{c_p} r \quad (10)$$

and the adiabat is quadratic in radius. Both the temperature gradient and the adiabatic gradient are linear in radius, hence if the geotherm is subadiabatic somewhere in the inner core, it is subadiabatic everywhere in the inner core. From comparison of equations (9) and (10), we found that the geotherm in the inner core is subadiabatic if the age of the inner core is larger than

$$\tau_{ic} > \tau_\kappa \left(\frac{dT_s}{dT_{ad}} - 1 \right) = \frac{r_{ic}^{*2}}{6\kappa} \left(\frac{m_P \rho c_p}{\alpha T} - 1 \right). \quad (11)$$

As might have been expected, the critical age of the inner core depends directly on the thermal diffusion timescale, but is also very sensitive to the ratio of the Clapeyron and adiabat slopes (which is a measure of the distance of the initial temperature profile from the adiabat). This criterion gives a very good estimate of the critical age if $r_{ic} \propto \sqrt{t}$. The assumption of constant cooling rate fails if a more realistic growth law¹³ is considered, but this criterion still gives a reasonable estimate of the critical age and has the advantage of making apparent the sensitivity of the thermal stratification limit to the relevant parameters. The problem here is that there are considerable uncertainties on both τ_κ and on dT_s/dT_{ad} . Taking the same range of parameters values as in figure S1 yields $\tau_\kappa = 1.4 \pm 0.3$ Gy, dT_s/dT_{ad} in the range 1.06–1.6, and a critical inner core age ranging from ~ 60 My to ~ 1 Gy, in excellent agreement with the numerical calculations.

2 Methods

We model the inner core as an isoviscous, incompressible fluid in a spherical shell of radius $r_{ic}(t)$. In the Boussinesq approximation, the equation of momentum conservation and light elements transport can be written in dimensionless form as

$$\mathbf{0} = -\nabla p - \frac{B(t)}{S_2} (\chi - \bar{\chi}) \mathbf{r} + \nabla^2 \mathbf{u} \quad (12)$$

$$\frac{\partial \chi}{\partial t} = -\tau_{ic} \frac{\dot{\Delta} c}{\Delta c} \chi - \frac{\tau_{ic}}{r_{ic}(t)/u_{ic}(t)} (S_2 \mathbf{u} - \mathbf{r}) \cdot \nabla \chi \quad (13)$$

BIBLIOGRAPHIE

165

where \mathbf{u} and p are the fluid velocity and dynamic pressure, χ is the scaled light element concentration, $\bar{\chi}$ is the horizontal average of χ , and \mathbf{r} is the radius vector. Lengths, fluid velocity and pressure have been scaled by $r_{ic}(t)$, $S_2 u_{ic}(t)$, and $\eta u_{ic}(t)/r_{ic}(t)$ respectively, where η is the dynamic viscosity and ρ the mean density of the inner core. The scaled concentration is defined as $\chi = [c - c(r = 0)]/\Delta c$, where c denotes the dimensionnal concentration in the inner core and $\Delta c = c(r_{ic}(t)) - c(r = 0)$. The buoyancy number B is

$$B = \frac{g(t)\beta\rho\Delta c(t)r_{ic}(t)^2}{\eta u_{ic}(t)}, \quad (14)$$

where $g(t) = (dg/dr)r_{ic}(t)$ is the gravity at the inner core boundary at time t . The value of B increase from 0 to $B^* = B(\tau_{ic})$ in the course of the simulation.

Taking into account the growth of the inner core is done naturally with the dynamical scaling⁷ used here. Indeed, scaling lengths by $r_{ic}(t)$ transforms the problem from a moving boundary problem into a fixed boundary problem, with $r \in [0, 1]$ and the ICB fixed at $r = 1$. Scaling the other variables with time-dependent scales present no technical advantage but gives a more physical definition of B . In the equation of chemical transport, the first term in the RHS of the equation is a sink term which appears because the concentration scale is time dependent. There is also an additionnal radial advection term due to the scaling of lengths by $r_{ic}(t)$, which accounts for the apparent inward transport of matter in the new referential. No similar term is introduced in the momentum conservation equation as long as inertia is negligible, which is indeed a most reasonable assumption since the Reynolds number is $\sim 10^{-16 \pm 5}$ for this flow.

With the dynamical scaling used here, the light element concentration is equal to 1 at the ICB during all the simulation. The inner core boundary is treated as a shear stress free surface, and, following Yoshida *et al.*¹⁵, the radial velocity is prescribed to be equal to the opposite of the solidification rate anomaly, $u_r(r_{ic}, \theta) = -S_2 u_{ic} P_2(\cos \theta)$. This is justified by the fact that the relaxation time τ_η of a degree 2 topography is very small compared to the age of the inner core. With no stratification,

$$\tau_\eta = \frac{19}{5} \frac{\eta}{\Delta\rho_{icb}gr_{ic}} \sim \left(\frac{\eta}{10^{16} \text{ Pa.s}} \right) \left(\frac{1221 \text{ km}}{r_{ic}} \right)^2 \times 0.45 \text{ year} \quad (15)$$

where $\Delta\rho_{icb}$ is the density jump at the ICB and g is the gravity at the ICB (the quadratic dependence in r_{ic} comes from the fact that $g \propto r_{ic}$). We have verified numerically that τ_η is not significantly larger if the inner core is stratified. As a consequence, the inner core topography must be in a quasi-steady state, with the growth rate anomaly balanced by the radial velocity at the ICB. There is still a residual ellipticity (*i.e.* a dynamical topography) which is computed *a posteriori* from continuity of the normal stress at the ICB. It is significantly larger than in the case with no stratification because of the contribution of the buoyancy forces to the dynamic pressure, but is always much smaller than the limit of resolution of seismology¹⁶.

References

- [1] F. Albarède. *Introduction to Geochemical Modeling*. ISBN 0521578043. Cambridge, UK: Cambridge University Press., 1996.

- [2] D. Alfè, M. J. Gillan, and G. D. Price. Ab initio chemical potentials of solid and liquid solutions and the chemistry of the Earth's core. *J. Chem. Phys.*, 116:7127–7136, 2002.
- [3] D. Gubbins, D. Alfè, G. Masters, G. D. Price, and M. Gillan. Gross thermodynamics of two-component core convection. *Geophys. J. Int.*, 157:1407–1414, 2004.
- [4] C. J. Allègre, J.-P. Poirier, E. Humler, and A. W. Hofmann. The chemical composition of the Earth. *Earth and Planetary Science Letters*, 134:515–526, 1995.
- [5] J. Badro, G. Fiquet, F. Guyot, E. Gregoryanz, F. Occelli, D. Antonangeli, and M. D'Astuto. Effect of light elements on the sound velocities in solid iron: Implications for the composition of Earth's core. *Earth and Planetary Science Letters*, 254:233–238, 2007.
- [6] N. L. Chabot, S. A. Saslow, W. F. McDonough, and T. J. McCoy. The effect of Ni on element partitioning during iron meteorite crystallization. *Meteoritics and Planetary Science*, 42:1735–1750, 2007.
- [7] Crank J. *Free and moving boundary problems*. Clarendon Press, Oxford, UK, 1984.
- [8] T. Yukutake. Implausibility of thermal convection in the Earth's solid inner core. *Phys. Earth Planet. Inter.*, 108:1–13, 1998.
- [9] F. D. Stacey. *Physics of the earth*.
- [10] L. Vočadlo. *Mineralogy of the Earth- The Earth's core: iron and iron alloys*. In *Treatise on Geophysics*, G. Schubert, Ed., Vol. 2, 2007.
- [11] A. M. Dziewonski and D. L. Anderson. Preliminary reference Earth model. *Phys. Earth Planet. Inter.*, 25:297–356, 1981.
- [12] D. Alf, M. J. Gillan, and G. D. Price. The melting curve of iron at the pressures of the Earth's core from ab initio calculations. *Nature*, 401:462–464, September 1999.
- [13] S. Labrosse, J.-P. Poirier, and J.-L. Le Mouél. The age of the inner core. *Earth planet. Sci. Lett.*, 190:111–123, 2001.
- [14] F. Nimmo. *Energetics of the Core*. In *Treatise on Geophysics*, G. Schubert, Ed., Vol. 8, 2007.
- [15] S. Yoshida, I. Sumita, and M. Kumazawa. Growth model of the inner core coupled with the outer core dynamics and the resulting elastic anisotropy. *J. Geophys. Res.*, 101:28085–28104, 1996.
- [16] A. Souriau and M. Souriau. Ellipticity and density at the inner core boundary from subcritical PKiKP and PcP data. *Geophysical Journal International*, 98:39–54, July 1989.

Iron meteorites and the physics of core crystallization in small differentiated bodies

Renaud Deguen

The large range in trace elements concentration measured within iron meteorite groups is usually thought to reflect fractional crystallization approaching ideal conditions, and has lead to favor an Earth-like outward crystallization mode. The recognition that core crystallization in asteroid-sized bodies would in fact start at the core-mantle boundary (CMB) makes the explanation of the observed chemical differentiation somewhat more problematic. We investigate here possible solidification regimes and discuss the implications of our physical models in terms of the resulting chemical fractionation.

Assuming first that the iron crystals stay fixed at the CMB, a dendritic layer will grow inward, releasing S-rich liquid in between the growing dendrites. In this configuration, the interdendritic melt is stably stratified, and no large scale convection occurs in the dendritic layer. The direct consequence is that there is no chemical flux from the dendritic layer to the inner liquid domain, which therefore does not evolve chemically: no global chemical differentiation would occur. We found however that the temperature within the liquid domain eventually falls below the solidification temperature before the solidification front reaches the center of the core, allowing secondary crystallization in the deep core. While this may drive convection in the liquid domain and allow its chemical evolution, the degree of differentiation by this process is actually found to be very small. Laboratory experiments suggest that the dendritic layer would grow until a critical thickness is reached, after which crystals will continuously fall from it. Relaxing the assumption of no crystal fall will help chemical fractionation, by removing iron rich crystals from the solidifying region, leaving behind a progressively more and more evolved liquid, and allowing further crystallization within the core. Fallen crystals will sediment and accumulate to form a partially solid inner core.

1 Introduction

The large range in trace elements concentration measured within iron meteorite groups is usually thought to reflect fractional crystallization approaching ideal conditions, implying efficient mixing of the liquid phase and limited chemical transport in the solid phase. This has initially lead to favor an Earth-like crystallization mode, where an inner core would crystallize at the center of the core, releasing light sulfur-rich liquid which, together with cooling at the core-mantle boundary (CMB), drive intense convective motions in the liquid outer core and allows efficient mixing. As solidification proceed, the outer core

evolve chemically, which results in a radial chemical fractionation imprinted in the growing inner core. The scale of the core ($\sim 10 - 100$ km) prevent significant leveling of the resulting chemical differentiation by solid-state diffusion.

However, if classical Rayleigh fractionation roughly explains the range in trace elements concentration within meteorites groups, it fails in explaining the details of the concentration trends (Chabot and Drake, 1999) and the scatter in element *vs.* element diagrams (Wasson, 1999). This can in part be due to the difficulty of modelling the segregation coefficients and their variations with the (evolving) liquid core chemistry, but it seems more and more clear that those deviations from the ideal segregation scheme suggest a more complex crystallization history (Chabot and Drake, 1999; Wasson, 1999).

From a physical point of view, an Earth-like solidification model is hardly tenable. Unlike in the Earth's core, the relative amplitudes of the adiabatic and melting temperature gradients at core pressure in asteroid-sized bodies are such that the solidification temperature is first reached at the core-mantle boundary CMB (Haack and Scott, 1992), so that core crystallization in iron-meteorites parent bodies most likely started at the CMB. This fact makes the explanation of the observed chemical differentiation somewhat more problematic: as explained in more details in part 2, it is known from experimental and theoretical studies that downward dendritic solidification of an alloy with a lighter solute (as is the core mixture) does not result in any significant chemical segregation (e.g. Kerr et al., 1990a). The reason of this is that in this configuration, the inter-dendritic melt is stably stratified, so that no convection occurs within the dendritic layer, and there is no solute flux from the mush to the melt.

Probably the most critical point is whether the newly solidified crystals (heavier than the liquid phase) stay firmly attached at the CMB or sink and sediment at the center of the core. Heterogeneous nucleation is energetically favored compared to crystals nucleation within the melt so we expect the first iron crystals to form directly on the silicate roof. Haack and Scott (1992) assumed iron dendrites to grow from the roof without any crystal fall, but one may rather conjecture that the dendritic crystals would only remain attached at the CMB until a critical size is reached at which the gravitational force overcomes the bonding forces between the iron crystals and the silicates. This view seems to be supported by experiments by Chen (2001), in which an ammonium chloride aqueous solution is crystallized from above; in those experiments, a dendritic layer forms at the top of the container and grows downward until a critical thickness is reached at which partial collapse of the dendritic layer occurred, followed by continuous fall of crystals. Depending on whether this critical thickness is smaller, of the same order or higher than the core radius, the core may have completely different solidification regimes.

The main problem in estimating this critical thickness is that the magnitude of the bonding force, which probably results from a combination of process at atomic and macroscopic scales, is very difficult to estimate, and is likely to also depend on the physical state of the silicate roof. In particular, the fraction of partial melting in the lower mantle is expected to be high at the beginning of the core crystallization ($T \sim 1700$ K), forming an unconsolidated cumulate of olivine crystals which may even be entrained in the shallowest part of the core by sinking solid iron crystals nucleated on it.

Given this difficulty, we choose in the present paper to begin by assuming all iron crystals to stay fixed at the top of the core. It is shown in part 2 that the

growing dendritic zone is stable against convection and that no global chemical differentiation would occur. In part 3, we show that secondary crystallization is expected to occur within the liquid while the dendritic layer grows from the CMB. This process may induce some chemical evolution of the melt and partial chemical differentiation of the core, but this effect is found to be small, and unable to explain the observed range in trace element concentration. We therefore conclude that global core chemical differentiation is only possible if there is a significant solid iron flux from the top of the core toward the center, in a way close to the 'snowing core regime' proposed for some terrestrial planets (Hauck et al., 2006; Stewart et al., 2007; Chen et al., 2008).

2 Inward solidification

We model the core mixture as a binary system, with Fe-Ni being the solvent (Ni does not significantly partition) and S being the solute (we assume that the presence of P and other minor elements have negligible consequences on the physics of core evolution). As cooling proceeds, the temperature eventually falls below the solidification temperature at which point crystals nucleate on the CMB and grow inward.

2.1 Planar or dendritic solidification?

Under most conditions, solidification of a multi-component melt is not planar (Kurz and Fisher, 1989). The solidification front is usually prone to a morphological instability which leads to the formation of a dendritic layer, or mushy zone, where solid dendrites coexist with a solute-enriched liquid. Striking evidences of dendritic solidification of iron meteorites parent bodies have been given by the study of the huge IIIAB Agpalilik iron, from the Cape York shower (Esbensen et al., 1982; Esbensen and Buchwald, 1982). Agpalilik is a piece of a single crystal whose $[100]_\gamma$ axis was parallel to the elongation direction of the troilite nodules, and to the apparent gravity field during solidification, as inferred from the preferential distribution of lighter and heavier minerals in the troilite nodules. Large trace elements concentrations gradients are found perpendicular to the apparent gravity field, suggesting that crystallization operate mostly in the direction perpendicular to the radial direction. These observations have been interpreted as reflecting dendritic growth, with an estimated interdendritic spacing ~ 5 to 25 m (Esbensen and Buchwald, 1982). Haack and Scott (1992) gave qualitative arguments for dendritic growth in case of inward solidification, noting that a stable S-rich boundary layer would build up below the solidification front and promotes undercooling and instability. In general, dendritic growth is promoted by small thermal gradients and large chemical gradients, and prevented by small solidification rates. In comparison with laboratory and industrial standards, both the solidification rate and thermal gradients are small, so whether the solidification front would be stable or not is not qualitatively obvious.

We therefore take a more quantitative approach. The approximate criterion for morphological instability of a solidification front (Mullins and Sekerka, 1963) is:

$$\frac{1}{k^\ell + k^s} \left(k^\ell \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{i^\ell} + k^s \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{i^s} \right) < \frac{\partial T_s}{\partial z} \Big|_{i^s} \Leftrightarrow \text{unstable.} \quad (1)$$

where the z -axis points toward the liquid, k^ℓ and k^s are the thermal conductivities of liquid and solid iron, T the temperature and T_s the solidification temperature. i^ℓ and i^s denote the interface on the liquid and solid sides respectively. If the solid and liquid thermal conductivities are taken to be equal, this criterion reduced to the condition of supercooling ahead of the solidification front.

Taking into account the pressure dependence of the solidification temperature (Shimizu et al., 2005; Deguen et al., 2007),

$$\left. \frac{\partial T_s}{\partial z} \right|_{i^s} = m_c \left. \frac{\partial c}{\partial z} \right|_{i^\ell} + m_P \left. \frac{\partial P}{\partial z} \right|_i \quad (2)$$

$$= m_c \left. \frac{\partial c}{\partial z} \right|_{i^\ell} + m_P \rho g_i, \quad (3)$$

where c is the concentration in sulphur and is initially equal to c_0 , P is the pressure, $m_c = \partial T_s / \partial c|_P$ is the liquidus slope, $m_P = \partial T_s / \partial P|_c$ is the Clapeyron slope, ρ the density and g_i the acceleration of gravity at the interface. Since the pressure term is positive, it has a destabilizing effect, which decrease as the solidification progress since g decrease to 0 at the center of the core.

Conservation of heat across the solid-liquid interface requires that

$$\rho^s L \frac{dr_i}{dt} = k^\ell \left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{i^\ell} - k^s \left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{i^s}, \quad (4)$$

so that the Mullins and Sekerka's criterion can be written equivalently as

$$\frac{1}{k^\ell + k^s} \left(2k^\ell \left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{i^\ell} - \rho^s L \frac{dr_i}{dt} \right) < m_c \left. \frac{\partial c}{\partial z} \right|_{i^\ell} + m_P \rho g_i \Leftrightarrow \text{unstable}. \quad (5)$$

We are left with the task of estimating the temperature and concentration gradients on the liquid side of the solidification front. We will not try to derive an exact expression for the stability criterion, but will rather search an upper bound of the temperature gradient and an upper bound of the concentration gradient (and so a lower bound of $m_c \partial c / \partial r|_{i^\ell}$, m_c being negative) to deduce a conservative stability criterion.

The temperature gradient is proportional to the heat flux F_T from the liquid domain to the solid and is related to the rate of cooling of the liquid domain by

$$k^\ell \left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{i^\ell} \equiv F_T = -\frac{\rho^\ell c_p^\ell r_i}{3} \frac{d\bar{T}}{dt}, \quad (6)$$

where r_i is the interface radius, \bar{T} is the mean temperature of the liquid domain and c_p^ℓ the heat capacity of liquid iron. An upper bound of F_T , and therefore an upper bound of the thermal gradient, can be found by assuming that the liquid core is vigorously convecting, in which case both temperature and concentration in the bulk liquid core would be homogeneous, except in a thin boundary layer. F_T would be maximum if the liquid domain cools down rapidly enough to stay at the liquidus. \bar{T} is accordingly assumed to be equal to the solidification temperature, $T_s = T_s(c_0) + m_c(c - c_0)$, and $d\bar{T}/dt = m_c dc/dt$. The chemical evolution of the liquid phase is given by the Rayleigh distillation equation,

which, in terms of the ratio of the solidification front radius to the core radius, writes

$$\bar{c}(t) = c_0 \left(\frac{r_i}{r_c} \right)^{3(k_S-1)}. \quad (7)$$

k_S is the sulphur distribution coefficient, and is smaller than 0.01. Using this expression leads to the following lower bound for the thermal gradient:

$$\left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{i^\ell} \leq (1 - k_S) \frac{m_c \bar{c}(t)}{\kappa} \frac{dr_i}{dt}. \quad (8)$$

In the more plausible case where convection is weak or nonexistent (see section 2.2), the heat flux will be in any case smaller than considered here so that a conservative criterion is found by taking this expression in equation (5).

On the other hand, conservation of sulfur across the solidifying boundary gives, recognizing that $c(i^\ell) > \bar{c}$,

$$m_c \left. \frac{\partial c}{\partial z} \right|_{i^\ell} = (1 - k_S) \frac{m_c c(i^\ell)}{D} \frac{dr_i}{dt} \quad (9)$$

$$\geq (1 - k_S) \frac{m_c \bar{c}(t)}{D} \frac{dr_i}{dt} \quad (10)$$

(e.g. Worster, 1985).

Inserting equation (8) and (10) into (5) yields the following (conservative) criterion for the morphological instability:

$$\bar{c}(t) > \frac{1}{2(1 - k_S)} \frac{\rho^s L}{\rho^\ell c_p |m_c|} \frac{D}{\kappa^\ell} \simeq 5 \times 10^{-3} \text{ wt.\%} \Rightarrow \text{unstable}. \quad (11)$$

(The destabilizing pressure gradient term is small compared to the other terms.) For any plausible sulfur abundance, the solidification front is always unstable; a mushy zone must therefore develop during the core solidification, irrespectively of the size or cooling rate of the parent body.

2.2 Dendritic solidification

Assuming that the iron crystals stay fixed at the CMB, a dendritic layer will therefore grows inward, releasing S-rich liquid in between the growing dendrites. Global chemical segregation would depend on the possibility and importance (?) of mass transfert between the crystallizing region and the liquid domain; we discuss here the stability of both the inner liquid core and the mushy layer against convection.

The mushy zone acts as a thermal buffer, accommodating most of the heat flux imposed at the CMB by crystallization and cooling within, such that the heat flux at the mush-liquid interface is essentially zero unless the inner liquid core is significantly superheated. The amount of superheat ΔT at the initiation of crystallization (i.e. the difference between the potential temperature of the core and the solidification temperature) would be approximately equal to the temperature drop across the thermal boundary layer at the CMB. An adaptation

to imposed flux convection of Howard's theory of boundary layer in thermal convection (Howard, 1963) (see appendix A) gives

$$\delta T \sim \left(\frac{\nu \kappa}{\alpha g} \right)^{1/4} \left(\frac{F_{cmb}}{k^\ell} \right)^{3/4} Ra_c^{1/4}, \quad (12)$$

where Ra_c is the appropriate critical Rayleigh number, of order 10^3 , ν is the kinematic viscosity and g the acceleration of gravity at the CMB. This scaling law predicts a temperature drop across the boundary layer of about 10^{-2} K. According to Jaupart and Brandeis (1986), thermal convection within the inner liquid domain will then cease in a timescale $\tau \sim (R^2/\kappa)Ra^{-1/3}$, where Ra is the Rayleigh number based on the initial amount of superheat. For a core radius of a few tens of kilometer, and $\Delta T \sim 10^{-2}$ K, τ is only a few decades, a negligibly small duration compared to the timescale of core crystallization. After this very short transient convective period, all the core superheat will have been removed, the thermal gradient at the solidification front will become lower than the adiabatic gradient and further cooling of the liquid inner core will proceed by conduction only.

Within the dendritic layer, the density of the liquid can be described by a linearized equation of state:

$$\rho = \rho_0[1 - \alpha(T - T_0) - \beta(c - c_0)], \quad (13)$$

where α and β are thermal and compositional expansion coefficients, respectively. Within the mushy zone, the liquid and solid phase are very close to thermodynamic equilibrium (Worster, 1985), so the temperature and the concentration of the liquid are coupled by the liquidus relationship $T - T_0 = m_c(c - c_0)$, which allows the equation (13) to be rewritten as

$$\rho = \rho_0[1 - \alpha^*(T - T_0)] \quad (14)$$

(Worster, 1991), where $\alpha^* = \alpha + m_c^{-1}\beta$ is a global expansion coefficient. $\alpha \simeq 1.2 \times 10^{-4}$, $\beta \sim 1$ and $m_c \simeq -1.3 \times 10^3$, which gives $\alpha^* \simeq -7 \times 10^{-4} < 0$. The density variations in the mush are dominated by the compositional contribution, making the colder liquid the lighter, and as $\partial\rho/\partial r = (\partial T/\partial r) \times (\partial\rho/\partial T) \propto -\alpha^*(\partial T/\partial r) < 0$, the mushy zone is stably stratified. There is no global convection in the dendritic layer, in contrast with the assumption of Haack and Scott (1992). Note that stability at the global scale does not rule out the possibility of pore-scale convection, which might helps diffusion to homogenize the interdendritic liquid.

Both the inner liquid domain and the interdendritic melt will then be stagnant. The direct consequence of this is that the liquid domain would not evolve chemically in response to crystallization and that no global chemical evolution would occur. The question now is how chemical differentiation can occur in such a model, and in what proportion?

3 Secondary crystallization

In a series of papers, Kerr et al. (1989, 1990a,b,c) developed a model for dendritic solidification from above, in configurations where the interdendritic melt

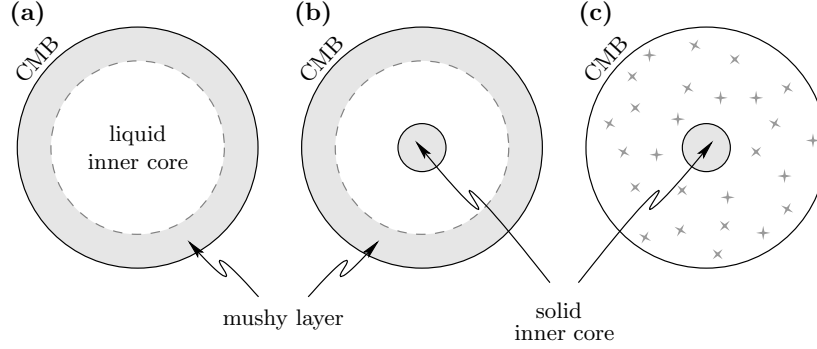


Figure 1: The three crystallization scenarios considered in the text. (a) inward dendritic solidification. (b) inward dendritic solidification plus secondary crystallization at the center of the core. (c) snowing core regime.

is stable against convection, taking into account kinetic undercooling. Solidification is inherently a non-equilibrium process: a finite amount of undercooling ΔT_i at the solidification front is necessary to drive solidification, with the solidification rate generally being an increasing function of the undercooling. Kerr et al. (1989, 1990a,b,c) demonstrated that, although relatively small, this undercooling is often sufficient in practice to drive vigorous convective motions which rapidly lead the whole liquid domain at a temperature slightly below the solidification temperature. Accordingly, the presence of any solid nucleus within the liquid domain would result in secondary crystallization far from the primary solidification region. This secondary crystallization rejects buoyant solute, thus both intensifying convection and allowing chemical evolution of the melt. This has been experimentally observed by Kerr et al. (1989, 1990b,c) using aqueous solutions, and has been predicted to have a significant effect on the chemical differentiation of magma chambers (Worster et al., 1990) and lava lakes (Worster et al., 1993).

A similar process might plausibly occur in planetesimals cores; we may imagine that some crystals fall from the mushy layer, settle at the center of the core and initiate a secondary solidification front growing outward. The sulfur-rich liquid released from this growing inner core is buoyant, will drive convection in between the inward and outward solidification front, and allows chemical evolution of the core. However, some complications arise from the pressure dependence of the solidification temperature and of the temperature profile. At the beginning of core solidification, the temperature profile will be close to the adiabat, which, as already stated, is steeper than the solidification profile. For a secondary solidification front to develop at the center of the core, the interface undercooling would then have to be higher than the difference between the adiabat and the solidification temperature at the center of the core, which is ~ 0.02 K for a core radius of ~ 20 km.

Kinetic undercooling will not be large enough to exceed this temperature drop because iron requires very small kinetic undercooling to grow, much smaller than most (faceted) silicate minerals (typical kinetic undercooling measured in laboratory are smaller than $\sim 10^{-4}$ K for solidification velocity of $\sim 10^{-4}$ m.s $^{-1}$

(Flemings, 1974), and would be even smaller at the small solidification rate involved here). Undercooling at the solidification front would rather be mainly due to the chemical undercooling due to the solute boundary layer which forms in response to solidification and solute segregation. An approximate relationship between the solidification velocity and the chemical undercooling is given by (e.g. Kurz and Fisher, 1989)

$$V = \mathcal{G}\Delta T^2 \quad (15)$$

where

$$\mathcal{G} = \frac{D}{\pi^2 |m_c| (1 - k_S) \Gamma c_0}, \quad (16)$$

Γ is the Gibbs-Thomson coefficient, $\Gamma = T_m \gamma / \rho L = 1.6 \times 10^{-7}$, where γ is the solid-liquid interfacial energy. With typical parameters values, \mathcal{G} is of order 10^{-5} (a verifier). With a solidification velocity of order 10^{-9} m.s $^{-1}$, which, as we shall see later, is a reasonable guess, equation (15) predicts a chemical undercooling of order 0.01 K. This is roughly of the same order of magnitude of the maximum difference between the solidification temperature profile and the adiabatic profile so we can expect that the whole core may become undercooled soon after (perhaps even before) the beginning of crystallization, aided by the slow conductive cooling of the inner liquid domain. At this stage, solidification can proceed within the inner liquid core either by nucleation and subsequent growth of iron crystals, or from iron crystals fallen from the mushy zone. In the latter case, we assume that the mass flux of fallen solid iron is negligible in the global mass balance.

To quantify the amount of secondary crystallization and the associated chemical differentiation, we developed a 1D numerical model of asteroid core crystallization. In this model, a dendritic layer grows inward from the CMB while the inner liquid domain cools by conduction until the temperature falls below the solidification temperature and secondary crystallization initiates. The mathematical formulation, described in details in appendix B along with the numerical procedure used to solve it, builds on Kerr et al. (1990a,b,c)'s model. The main differences are the spherical geometry of the present computation, the formulation of the interface undercooling, the pressure dependance of the solidification temperature, the condition of imposed heat flux at the cooled boundary in place of imposed temperature and the fact that cooling of the inner liquid domain is by conduction from an initial adiabatic state with no superheat whereas convection accounts for most of the heat transfer in Kerr et al. (1990a,b,c)'s model. The mushy layer is described as a continuum (Worster, 1985) where the solid and liquid phases coexist at thermodynamic equilibrium. Temperature and sulfur concentration are then coupled by the liquidus relation, while the solid fraction ϕ is related to sulfur concentration by the Rayleigh equation. At the solidification front, the Stefan condition (heat conservation across the interface) is imposed along with the growth law (15).

In the low gravity environment of the center of the core, interstitial melt convection and compaction of the sedimented solid matrix are unlikely to quantitatively remove all the trapped liquid. However, we want to maximize the chemical differentiation and therefore ignore the occurrence of trapped melt in the inner core. The solute is assumed to be integrally rejected in the liquid

domain. We can then estimate the rate of secondary crystallization from global heat and mass balances, and compute the evolution of the radius of the solid inner core and the associated enrichment in sulfur of the liquid region as the inward solidification front progress.

The physical parameters used in this study are listed in table 1. We considered initial sulfur concentration c_0 between 2 wt.% and 10 wt. % (Wasson, 1999; Chabot, 2004). An order of magnitude estimate of the CMB heat flux can be found as follows. The cooling rate of meteorites as recorded in the Widmanstätten patterns provides a direct estimate of the CMB heat flux in the temperature range of taenite-kamacite exsolution ($\sim 500 - 700$ K). At these temperatures, there is no significant heat source in the core, so that F_{cmb} is directly proportional to the cooling rate:

$$F_{cmb} = \frac{\rho^s c_p^s r_c}{3} \frac{d\bar{T}}{dt}, \quad (17)$$

where \bar{T} is the mean temperature of the core. Because of the high thermal conductivity of iron and of the slow cooling rate, variations of temperature in the core are expected to be small. Haack et al. (1990) found empirical relations between the core cooling rate in the Widmanstätten window and the asteroid radius. Using their equation (3a) and assuming the core radius to be approximately half of the asteroid core gives CMB heat flux between 5×10^{-3} and 0.05 W.m^{-2} for core radius of 50 km and 10 km respectively. The thermal evolution models of Haack et al. (1990) suggest that the heat flux was about two or three times higher during core crystallization. In addition the melt fraction in the mantle at the onset of core crystallization was high ($\sim 40 - 50$ % (e.g. Taylor et al., 1993)) and convective heat transfer by the liquid silicate phase is expected to be significant. Values between 0.05 and 0.2 W.m^{-2} have been considered in our calculations.

Table 1: Parameters used in this study.

Parameter	Symbol	Value
Liquidus slope	m_c	-1.3×10^3 K
Initial sulfur abundance	c_0	2 or 10 wt. %
Solid iron density	ρ^s	7300 kg.m^{-3}
Liquid iron density	ρ^ℓ	7030 kg.m^{-3}
Heat capacity	c_P	$600 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$
Latent heat	L	270 kJ kg^{-1}
Thermal conductivity	k	$32 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$
Thermal diffusivity	κ	$6 \times 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$
Chemical diffusivity	D_S	$10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$
Interfacial energy	γ	0.2 J m^{-2}

Figure 2 shows the evolution with non-dimensionnal time of the inward and outward solidification fronts for various values of core radius, initial sulfur concentration and CMB heat flux. The important result of these computations is that the final radius of the inner core is quite small, at most 7 % of the core radius in our calculations, and is a weak function of the parameters (r_c , F_{cmb}

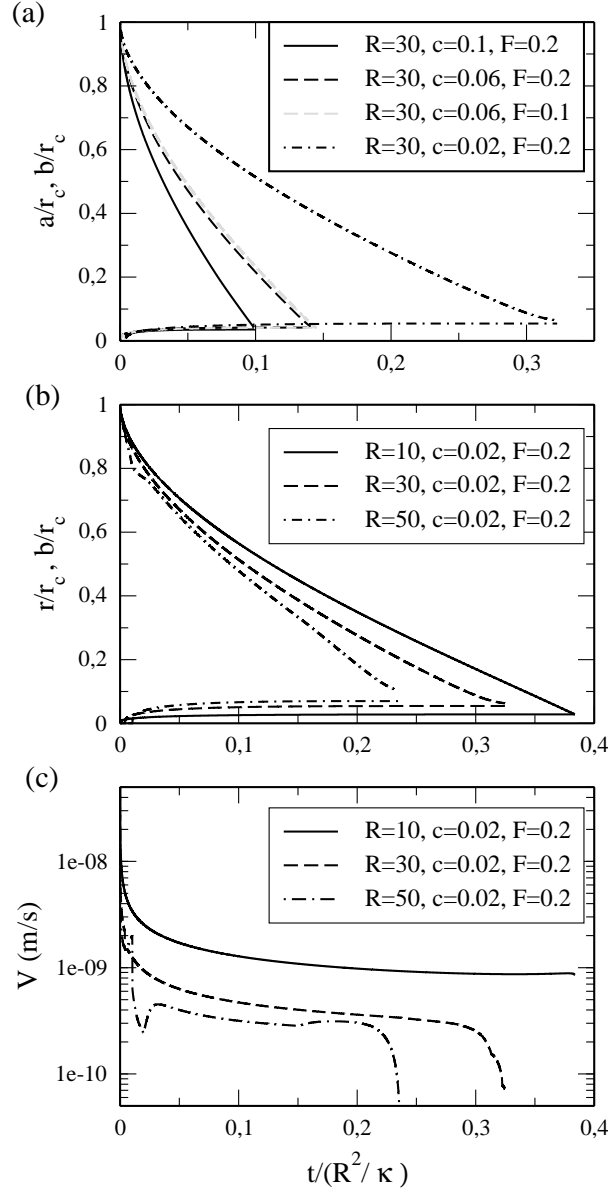


Figure 2: (a) and (b): Evolution with time of the inward solidification front and of inner core radius, for a given core radius (a) and fixed S concentration and CMB heat flux (b). Time is made non-dimensional by dividing it by the thermal diffusion timescale $\tau_\kappa = R^2/\kappa$. Note that the heat flux has a very small influence on the propagation of both solidification fronts. The most important parameter for the solidification fronts evolution is the initial sulfur content of the core because ... on the solid fraction in the mushy layer. (c) Solidification rate at the inward and outward solidification front for the same parameter values as in figure (b).

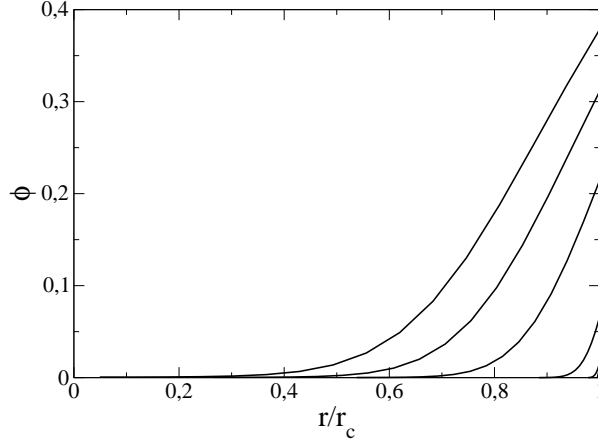


Figure 3: Solid fraction ϕ profiles at different times, for a core radius of 30 km, a sulfur concentration of 6 wt.% and a CMB heat flux of 0.2 W.m^{-2} . The solid fraction of the inner core, assumed to be 1, is not represented. When the inward and outward solidification front meets, the solid fraction is only ~ 0.4 at the CMB and is much smaller in the deep core.

and c_0). This is less than 0.04 % of the total volume of the core and the associated chemical differentiation would be very small; we found that the sulfur enrichment $\Delta c/c_0$ is at most 1 ‰. Chemical fractionation by this process would be negligible.

Note that the time needed for the two solidification fronts to meet is quite small compared to the time needed to crystallize the whole core. For example, in a core 30 km in radius with initial sulfur concentration $c_0 = 10 \text{ wt.}\%$ and a CMB heat flux of 0.1 W.m^{-2} , the inward solidification front meet the outward front less than 1 My after the beginning of crystallization (figure 2), while about 15 My is needed to crystallize the whole core if the CMB heat flux is assumed to be constant. The reason of this is that at this time the mean solid fraction in the core is still quite small, as is apparent in figure 3. In this model, most of the solidification would occur within the dendritic layer after the whole core is in a mushy state.

4 Discussion and conclusion

We conclude from the above discussion that the hypothesis that the newly formed solid stay hanged on the CMB must be at least partially relaxed: if not, no significant global chemical segregation would occur. Relaxing the assumption of no crystal fall will help chemical fractionation, by progressively removing iron rich crystals from the solidifying region, leaving behind a progressively more and more evolved liquid, and allowing further crystallization within the core. Fallen crystals will sediment and accumulate to form a partially solid inner core. This solid iron flux also induce a negative heat flux which helps cooling the deep core and allows futher crystallization in the deep core.

If most of the solid crystallized near the CMB effectively sink toward the center of the core, the core chemical evolution would be in fact close to fractional, with deviations coming mostly from the presence of partially solidified zones: some liquid is expected to be trapped in both the loosely packed inner core and the dendritic zone below the CMB.

In the scenarios considered here, a significant amount of liquid will be trapped within the crystallizing regions, either as interdendritic melt or between sedimented, loosely packed, iron grains. Further crystallization of this melt will induce a secondary chemical differentiation, leveled by solid state diffusion, which may account for the scatter in element vs. element diagrams (Wasson, 1999) and for the distinct compositional trend measured in the Cape York meteorites shower (Esbensen et al., 1982; Esbensen and Buchwald, 1982). This idea bears some resemblance with the model of Wasson (1999), who proposed that the observed scatter in IIIAB chemical trends can be explained by mixing solid and trapped liquid, but we think it is probably more accurate to consider it as resulting from the diffusion-leveled segregation associated with the continuing crystallization of interstitial melt. This idea is testable in theory. In this model, the final concentration range of a given trace element would depend not only on its partitioning behaviour, but also on its diffusion coefficient in solid iron. At equivalent partitioning, an element which diffuses slowly is expected to get more differentiated than an element with a high diffusivity. The resulting differentiation would be somewhere between the two limiting cases of complete chemical homogenisation and no differentiation, and no diffusion, which is described by the Rayleigh equation.

References

- Chabot, N. L., 2004. Sulfur contents of the parental metallic cores of magmatic iron meteorites. *Geochimica and Cosmochimica Acta* 68, 3607–3618.
- Chabot, N. L., Drake, M. J., 1999. Crystallization of magmatic iron meteorites: The role of mixing in the molten core. *Meteoritics and Planetary Science* 34, 235–246.
- Chen, B., Li, J., Hauck, S. A., 2008. Non-ideal liquidus curve in the Fe-S system and Mercury’s snowing core. *Geophysical Research Letters* 35, 7201–+.
- Chen, F., 2001. Stability analysis on convection in directional solidification of binary solutions. *Proc. Natl. Sci. Counc. ROC(A)* 25, 71–83.
- Deguen, R., Alboussière, T., Brito, D., 2007. On the presence and structure of a mush at the inner core boundary of the Earth. *Phys. Earth Planet. Inter.*
- Esbensen, K. H., Buchwald, V. F., 1982. Planet(oid) core crystallisation and fractionation - Evidence from the Agpalilik mass of the Cape York iron meteorite shower. *Physics of the Earth and Planetary Interiors* 29, 218–232.
- Esbensen, K. H., Buchwald, V. F., Malvin, D. J., Wasson, J. T., 1982. Systematic compositional variations in the Cape York iron meteorite. *Geochimica and Cosmochimica Acta* 46, 1913–1920.

- Flemings, M. C., 1974. *Solidification Processing*. McGraw-Hill Book Co., New York, London and Sydney, 364 p.
- Haack, H., Rasmussen, K. L., Warren, P. H., 1990. Effects of regolith/megaregolith insulation on the cooling histories of differentiated asteroids. *Journal of Geophysical Research* 95, 5111–5124.
- Haack, H., Scott, E. R. D., Sep. 1992. Asteroid core crystallization by inward dendritic growth. *Journal of Geophysical Research* 97, 14727–14734.
- Haack, S. A., Aurnou, J. M., Dombard, A. J., 2006. Sulfur's impact on core evolution and magnetic field generation on Ganymede. *Journal of Geophysical Research (Planets)* 111, 9008–+.
- Howard, L. N., 1963. Heat transport by turbulent convection. *Journal of Fluid Mechanics* 17, 405–432.
- Jaupart, C., Brandeis, G., Oct. 1986. The stagnant bottom layer of convecting magma chambers. *Earth and Planetary Science Letters* 80, 183–199.
- Kerr, R. C., Woods, A. W., Worster, M. G., Huppert, H. E., Aug. 1989. Disequilibrium and macrosegregation during solidification of a binary melt. *Nature* 340, 357–362.
- Kerr, R. C., Woods, A. W., Worster, M. G., Huppert, H. E., 1990a. Solidification of an alloy cooled from above. Part 1. Equilibrium growth. *Journal of Fluid Mechanics* 216, 323–342.
- Kerr, R. C., Woods, A. W., Worster, M. G., Huppert, H. E., 1990b. Solidification of an alloy cooled from above. Part 2. Non-equilibrium interfacial kinetics. *Journal of Fluid Mechanics* 217, 331–348.
- Kerr, R. C., Woods, A. W., Worster, M. G., Huppert, H. E., 1990c. Solidification of an alloy cooled from above. Part 3. Compositional stratification within the solid. *Journal of Fluid Mechanics* 218, 337–354.
- Kurz, W., Fisher, D., 1989. *Fundamentals of Solidification*. Trans Tech Publications, Switzerland, 305pp.
- Mullins, W., Sekerka, R., 1963. Stability of a planar interface during solidification of a dilute binary alloy. *Journal of Applied Physics* 35, 444–451.
- Shimizu, H., Poirier, J., Le Mouél, J., 2005. On crystallization at the inner core boundary. *Phys. Earth Planet. Inter.* 151, 37–51.
- Stewart, A. J., Schmidt, M. W., van Westrenen, W., Liebske, C., 2007. Mars: A New Core-Crystallization Regime. *Science* 316, 1323–.
- Taylor, G. J., Keil, K., McCoy, T., Haack, H., Scott, E. R. D., 1993. Asteroid differentiation - Pyroclastic volcanism to magma oceans. *Meteoritics and Planetary Science* 28, 34–52.
- Wasson, J. T., 1999. Trapped melt in IIIAB irons: Solid/Liquid elemental partitioning during the fractionation of the IIIAB magma. *Geochimica and Cosmochimica Acta* 63, 2875–2889.

- Worster, M. G., 1985. Solidification of an alloy from a cooled boundary. *Journal of Fluid Mechanics* 167, 481–501.
- Worster, M. G., 1991. Natural convection in a mushy layer. *Journal of Fluid Mechanics* 224, 335–359.
- Worster, M. G., Huppert, H. E., Sparks, R. S. J., Nov. 1990. Convection and crystallization in magma cooled from above. *Earth and Planetary Science Letters* 101, 78–89.
- Worster, M. G., Huppert, H. E., Sparks, R. S. J., Sep. 1993. The crystallization of lava lakes. *Journal of Geophysical Research* 98, 15891–15902.